درس ریاضی فیزیک ۳

فصلِ چهارم:

بررسی چند تابع خاص ریاضی ـ فیزیک: چند جمله ایهای هرمیت؛ لاگر؛ چبی شف.

در این فصل به طورِ مختصر به بیانِ چند تابعِ خاص در ریاضی- فیزیک می پردازیم: چند جمله ایهای متعامد هرمیت، لاگر و چند جمله ایهای نوعِ اوّل و دوّم چبی شف. اگر چه این توابع به اهمّیتِ توابعِ بسل و لژاندر نیستند امّا در جایگاه خود ویژگی هایی دارند که بررسی آنها را با ارزش می سازد.

۴ – ۱. چند جمله ایهای هرمیت:

چند جمله ایهای هرمیت، $H_n(x)$ ، را می توان از طریق تابع مولد به صورت زیر تعریف کرد:

$$g(x,t) = e^{-t^2+2xt} = e^{x^2} . e^{-(t-x)^2} = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \frac{t^n}{n!}; \qquad (۱)$$

در نخستین نگاه، مقادیر خاص این چند جمله ای به راحتی نتیجه می شود:

$$H_{2n}(0) = (-1)^n \frac{(2n)!}{n!} \;; \qquad H_{2n+1}(0) = 0$$

$$H_n(-x) = (-1)^n H_n(x)$$

رابطه آخر نوع پاریته چند جمله ای هرمیت را نشان می دهد یعنی پاریته این چند جمله ای از مرتبۀ $(-1)^n$ است. اکنون سعی می کنیم از طریقِ مشتق گیری تابع مولّد نسبت به t و x معادلۀ دیفرانسیلِ هرمیت را به دست آوریم. نخست از دو طرفِ رابطۀ (۱) نسبت به t مشتق گرفته و ضریبِ توان های همانند t را مساوی قرار می دهیم. نتیجه رابطۀ بازگشتی زیر است:

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x); \qquad (۲)$$

همچنین مشتق گیری نسبت به x رابطۀ بازگشتی بعدی را به دست می دهد:

$$H_n'(x) = 2nH_{n-1}(x); \qquad (۳)$$

حال از رابطۀ فوق نسبت به x مشتق می گیریم:

$$2nH_{n-1}'(x) = 2H_n(x) + 2xH_n'(x) - H_{n+1}'(x)$$

$$H_n''(x) = 2nH_{n-1}'(x)$$

در نهایت با اندکی محاسبه و جایگذاری در روابط بالا به معادلهٔ دیفرانسیلی دست می یابیم که آن را معادلهٔ دیفرانسیلِ هرمیت می نامیم:

$$H_n''(x)-2xH_n'(x)+2nH_n(x)=0; \qquad (٤)$$

تمرین ـ محاسباتِ لازم را به دقّت انجام داده و معادلهٔ دیفرانسیلِ هرمیت، یعنی معادلهٔ (۴)، را استخراج کنید.

معادلهٔ دیفرانسیلِ هرمیت، معادلهٔ هرمیتی یا خودالحاقی نیست امّا با استفاده از شیوهٔ متعامد سازی و استفاده از تابعِ وزن $e^{-x^2/2}$ تابعِ متعامدِ هرمیت با تابعِ وزنِ واحد به صورتِ زیر به دست می آید (به بخشِ توابعِ متعامد و سیستمِ اشتورم ـ لیوویل مراجعه کنید):

$$\varphi_n(x)=e^{-x^2/2}H_n(x)$$

و در نتیجه،

$$\varphi_n''(x)+\left(2n+1-x^2\right)\varphi_n(x)=0; \qquad (۵)$$

معادلهٔ به دست آمده بر حسبِ $\varphi_n(x)$ هرمیتی است ولی دیگر خودِ $\varphi_n(x)$ به صورتِ چند جمله ای نخواهد بود. پاسخ های $\varphi_n(x)$ در بازهٔ $(-\infty,\infty)$ با تابعِ وزنِ واحد متعامد هستند. در مکانیکِ کوانتومی می بینیم که معادلهٔ نوسانگرِ هارمونیک در سیستمِ کوانتومی به شکلِ معادلهٔ (۵) در می آید. در بخشِ بعد به این مهم ترین کاربردِ چند جمله ای هرمیت می پردازیم.

خاصیّتِ تعامد در موردِ چند جمله ای های هرمیت به صورتِ زیر نوشته می شود:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}H_n(x)H_m(x)\,dx=2^n\pi^{1/2}n!\,\delta_{nm}; \qquad (٦)$$

$H_n(x)$ به صورت های دیگری نیز معرّفی می شود که مهم ترین آنها یکی نمایشِ رودریگرز است و دیگری استفاده از قضیّهٔ مانده ها در بخشِ توابعِ مختلط است:

$$H_n(x)=(-1)^n e^x\frac{d^n}{dx^n}\left(e^{-x^2}\right); \qquad (٧)$$

$$H_n(x)=\frac{n!}{2\pi!}\oint t^{-n-1}e^{-t^2+2xt}dt$$

۴ -۲. بررسی نوسانگرِ هارمونیک در مکانیکِ کوانتومی:

این بحث را در دو بخش مطرح می‌کنیم. نخست به حلِّ معادلهٔ دیفرانسیلِ شرودینگر می‌پردازیم. در ادامه شیوهٔ عملگری منتسب به اِکارت و دیراک را پی می‌گیریم و از دیدِ مکانیکِ ماتریسی به بررسی نوسانگر می‌پردازیم.

۴-۲-۱. شیوهٔ حلِّ معادلهٔ دیفرانسیل:

معادلهٔ شرودینگر برای نوسانگرِ هارمونیک، یعنی ذرّه‌ای به جرمِ m و انرژی پتانسیلِ $V=\frac{1}{2}m\omega^2x^2$ چنین است:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\psi=0 \tag{۸}$$

در حرکتِ کلاسیک، چنانچه دیدیم، انرژی برابر است با $E=\frac{1}{2}m\omega^2a^2$، که در آن a دامنهٔ نوسان است. از این‌رو چنانچه دامنهٔ نوسانِ کلاسیک را با انرژی $\frac{1}{2}\hbar\omega$ (انرژی بنیادی نوسانگرِ کوانتومی – این موضوع بعداً ثابت می‌شود) برابر بگیریم، آنگاه:

$$E=\frac{1}{2}\hbar\omega=\frac{1}{2}m\omega^2a^2\Rightarrow a=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

بنابراین a را می‌توان به عنوانِ واحد فاصله گرفت (مقیاسِ طول[۱]) و تغییرِ متغیّرِ بدونِ بُعدِ زیر را به‌کار برد:

$$x=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}u \tag{۹}$$

بدین ترتیب u متغیّرِ بدونِ بُعد است. آنگاه با انتخابِ $E=\hbar\omega\varepsilon$،

$$\frac{d\psi}{dx}=\frac{d\psi}{du}.\frac{du}{dx}=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\frac{d\psi}{du}$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}=\frac{m\omega}{\hbar}\frac{d^2\psi}{du^2}$$

$$\Rightarrow\frac{m\omega}{\hbar}\frac{d^2\psi}{du^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-\frac{1}{2}m\omega^2.\frac{\hbar}{m\omega}u^2\right)\psi=0$$

---

[۱]- Length scale

$$\Rightarrow \psi'' + \left(2\varepsilon - u^2\right)\psi = 0 \qquad (۱۰)$$

رابطهٔ فوق به نامِ معادلهٔ دیفرانسیلِ وِبِر[۲] معروف است. واضح است که تمامِ ویژه توابعِ سیستم به حالت‌های کراندار با انرژی مثبت تعلّق دارند و به ازای $|x| \to \infty$، باید صفر شوند. پاسخِ مجانبی معادله هنگامی که $|u| >> \sqrt{\varepsilon}$ است، چنین می‌شود:

$$\psi'' \approx u^2\psi \Rightarrow \psi \approx e^{-\frac{1}{2}u^2} \qquad (۱۱)$$

بنابراین به این نتیجه می‌رسیم که معادلهٔ (۱۰) باید دارای پاسخی از نوع

$$\psi(u) = e^{-\frac{1}{2}u^2}\phi(u) \qquad (۱۲)$$

باشد. معادلهٔ دیفرانسیل برحسبِ $\phi(x)$ از نشاندن مقدارِ فوق در معادلهٔ (۱۰) حاصل می‌شود:

$$\psi' = -ue^{\frac{-1}{2}u^2}\phi + e^{-\frac{1}{2}u^2}\phi' \Rightarrow \psi'' = -e^{\frac{-1}{2}u^2}\phi + u^2e^{\frac{-1}{2}u^2}\phi - 2ue^{-\frac{1}{2}u^2}\phi' + e^{\frac{-1}{2}u^2}\phi''$$

$$\Rightarrow \phi'' - 2u\phi' + \left(2\varepsilon - 1\right)\phi = 0 \qquad (۱۳)$$

با روشِ فروبنیوس معادلهٔ فوق را حلّ می‌کنیم و شرطی را می‌یابیم که ϕ در ازای آن چند جمله‌ای متناهی شود:

$$\phi = \sum a_n u^{n+\rho}$$

$$\Rightarrow \sum (n+\rho)(n+\rho-1)a_n u^{n+\rho-2} - 2\sum (n+\rho)a_n u^{n+\rho} + (2\varepsilon - 1)\sum a_n u^{n+\rho} \equiv 0 \qquad (۱۴)$$

پس از مرتّب کردنِ جملات، رابطهٔ بازگشتی زیر نتیجه می‌شود:

$$a_{n+2} = -\frac{2\varepsilon - 1 - 2n - 2\rho}{(n+\rho+2)(n+\rho+1)}a_n = -\frac{2\varepsilon - 2\rho - 1 - 2n}{(n+\rho+2)(n+\rho+1)}a_n \qquad (۱۵)$$

ریشه‌های معادلهٔ اندیسی عبارت است از (به ازای $n = -2$):

$$\rho(\rho - 1) = 0 \Rightarrow \rho = 0,1$$

طبقِ قضیهٔ فوکس[۳]، از آن‌جا که اختلافِ ریشه‌های معادلهٔ اندیسی عددِ صحیح است، در حالت کلّی فقط یک پاسخ از طریقِ سری برای معادله به‌دست می‌آید و معمولاً ریشهٔ بزرگتر این پاسخ

---

[۲] - Weber's differential equation

[۳] - به کتابِ «روش‌های ریاضی در فیزیک»، تألیفِ نگارنده، جلدِ دوّم، فصلِ پانزدهم، انتشاراتِ دانشگاه الزّهرا، ۱۳۸۳ مراجعه کنید.

را می‌دهد. در حالتِ نوسانگر دو جواب را خواهیم یافت: به ازای $\rho = 0$ همان، پاسخِ سری مک- لورن و پاسخِ توابعِ زوج به‌دست می‌آید. در ازای $\rho = 1$، جواب‌های فرد را خواهیم داشت[۴]. چنانچه $n = -1$ را قرار دهیم $\rho = 0$ و $\rho = -1$ به‌دست می‌آید که $\rho = -1$ پاسخِ معادلهٔ اندیسی را نمی‌دهد. به ازای $\rho = 0$ و این شرط که ϕچند جمله‌ای باشد، مقادیرِ انرژی حاصل می‌شود:

$$2\varepsilon - 1 - 2n = 0 \Rightarrow \varepsilon = n + \frac{1}{2} \tag{۱۶}$$

$$E = \hbar\omega\varepsilon = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{۱۷}$$

برای این‌که همانندیِ معادلهٔ (۱۳) را با معادلهٔ هرمیت دریابیم، به‌طورِ مستقیم از تعریفِ تابعِ مولّد معادلهٔ دیفرانسیلِ هرمیت را استخراج می‌کنیم: چند جمله‌ای‌های هرمیت، $H_n(x)$، را می‌توان به‌کمکِ تابعِ مولّد به‌صورتِ زیر نمایش داد:

$$g(x,t) \equiv e^{x^2-(t-x)^2} \equiv e^{-t^2+2xt} = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x)\frac{t^n}{n!} \tag{۱۸}$$

در نخستین نگاه مقادیرِ خاصّ چند جمله‌ای هرمیت نتیجه می‌شود:

$$H_{2n}(0) = (-1)^n \frac{(2n)!}{n!} \tag{۱۹}$$

همچنین،

$$\begin{gathered} H_{2n+1}(0) = 0 \\ H_n(-x) = (-1)^n H_n(x) \end{gathered} \tag{۲۰}$$

این رابطه خود نوعِ پاریتهٔ چند جمله‌ای هرمیت را نشان می‌دهد. اکنون از تابعِ مولّد نسبت به t مشتق می‌گیریم و ضریبِ توان‌های همانند t را مساوی هم قرار می‌دهیم. رابطهٔ بازگشتی زیر حاصل می‌شود:

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x) \tag{۲۱}$$

مشتق گیری نسبت به x نیز رابطهٔ بازگشتی مهمّ دیگری را نتیجه می‌دهد:

---

[۴] – بدین ترتیب پاسخ‌های زوج و فرد در این سیستم از هم جدا می‌شوند. به بیانِ دیگر پاریتهٔ نوسانگر حفظ می‌شود و باید چنین باشد چرا که پتانسیل، تابعی زوج است و در نتیجه $H(-x) = H(x)$ می‌شود.

$$H_n'(x) = 2nH_{n-1}(x) \qquad (۲۲)$$

حال از دو رابطهٔ اخیر نسبت به x مشتق می‌گیریم:

$$2nH_{n-1}'(x) = 2H_n(x) + 2xH_n'(x) - H_{n+1}'(x) \qquad (۲۳)$$

$$H_n''(x) = 2nH_{n-1}'(x) \qquad (۲۴)$$

و از رابطهٔ (۲۲) داریم:

$$H_{n+1}'(x) = 2(n+1)H_n(x) \qquad (۲۵)$$

بنابراین

$$\begin{aligned} &2nH_{n-1}'(x) = 2H_n(x) + 2xH_n'(x) - 2(n+1)H_n(x) \\ &\Rightarrow H_n''(x) = 2xH_n'(x) - 2nH_n(x) \\ &\Rightarrow H_n''(x) - 2xH_n'(x) + 2nH_n(x) = 0 \end{aligned} \qquad (۲۶)$$

این رابطه همان معادلهٔ (۱۳) برای ϕ است، به‌طوری‌که

$$2n = 2\varepsilon - 1 \Rightarrow \varepsilon = n + \tfrac{1}{2} \Rightarrow E = \left(n + \tfrac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

پاسخِ تابعِ موج به‌صورتِ چند جمله‌ای هرمیت ظاهر می‌شود. چند جملهٔ اوّل آن را می‌نویسیم:

$$H_0(x) = 1, H_1(x) = 2x, H_2(x) = 4x^2 - 2, H_3(x) = 8x^3 - 12x, \ldots$$

بدین ترتیب توابعِ موجِ نوسانگر به‌صورتِ

$$\psi_n(x) = A_n e^{-x^2/2} H_n(x) \qquad (۲۷)$$

یعنی چند جمله‌ای‌های متعامد هرمیت ظاهر می‌شوند. ضریبِ بهنجارش A_n برابر است با

$$A_n = \left(\frac{1}{2^n n! \pi^{\frac{1}{2}}}\right)^{\frac{1}{2}} \qquad (۲۸)$$

و ویژه توابعِ متعامدِ نوسانگرِ هارمونیک عبارتند از:

$$\psi_n(u) = \frac{\pi^{\frac{-1}{4}}}{\sqrt{2^n n!}} e^{\frac{-u^2}{2}} H_n(u) \qquad (۲۹)$$

که در آن، $H_n(u)$ چند جمله‌ای‌های هرمیت، از رابطهٔ زیر تعریف می‌شوند (نمایشِ رودریگز):

$$H_n(u) = (-1)^n e^{u^2} \frac{d^n}{du^n}\left(e^{-u^2}\right) \qquad (۳۰)$$

برحسبِ توابعِ ψ_n، روابط بازگشتی زیر نتیجه می‌شود:

$$a)\ \sqrt{n+1}\psi_{n+1} - \sqrt{2}u\psi_n + \sqrt{n}\psi_{n-1} = 0$$

$$b)\ u\psi_n + \psi'_n = \sqrt{2n}\psi_{n-1}$$

$$c)\ u\psi_n - \psi'_n = \sqrt{2(n+1)}\psi_{n+1}$$

اکنون در زیر ضریبِ بهنجارشِ A_n را به‌دست می‌آوریم: تابعِ مولّدِ چند جمله‌ای‌های هرمیت به‌صورتِ زیر تعریف می‌شود:

$$g(x,t) = e^{-t^2+2xt} = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x)\frac{t^n}{n!} \qquad (۳۱)$$

به‌کمکِ این رابطه، از شرطِ بهنجارشِ زیر، عبارتِ A_n را استخراج می‌کنیم:

$$|A_n|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} H_n^2(x)dx = 1$$

انتگرالِ بهنجارشِ فوق را می‌توان با انتگرال‌گیری از معادلهٔ

$$e^{-x^2} g^2(x,t) = \sum_{m,n} e^{-x^2} H_m(x)H_n(x)\frac{t^{m+n}}{m!n!}$$

بین دو حدِّ $\pm\infty$ برای $m=n$ محاسبه کرد. بنابراین:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} g^2(x,t)dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\left(x^2-4xt+2t^2\right)}dx = \sqrt{\pi}e^{2t^2}$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} H_n^2(x)dx \frac{t^{2n}}{(n!)^2}$$

با نوشتنِ

$$\sqrt{\pi}e^{2t^2} = \sqrt{\pi}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{2^n t^{2n}}{n!}$$

و مقایسهٔ جملاتِ t^{2n} در دو سری تیلور، رابطهٔ

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} H_n^2(x)dx = 2^n n!\sqrt{\pi}$$

به‌دست می‌آید. بنابراین ثابتِ بهنجارش برابر است با:

$$A_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n!\sqrt{\pi}}} \tag{۳۲}$$

۴-۲-۲. بررسی عملگری نوسانگرِ هارمونیکِ کوانتومی:

اکنون به بررسی نوسانگرِ هارمونیک از طریقِ معرّفی شیوهٔ عملگری می‌پردازیم. هامیلتونی سیستم و معادلهٔ شرودینگر چنین است:

$$H = \frac{1}{2m}\left(p^2\right) + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \tag{۳۳}$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)\psi_n(x) = E_n\psi_n(x) \tag{۳۴}$$

در این رابطه $p = -i\hbar\frac{d}{dx}$ است. برای حلِّ این مسأله از روشِ عملگری دیراک کمک می‌گیریم. این شیوه بعدها در مباحثِ پیشرفته‌تر به‌کار می‌آید و نسبت به حلِّ مستقیمِ معادلهٔ شرودینگر از توانایی بیشتری برخوردار است. نخست تغییرِ متغیّرهای زیر را به‌کار می‌بریم:

$$H = \hbar\omega H, E_n = \hbar\omega\varepsilon_n$$

$$x = \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{1}{2}} Q = x_0 Q; p = (\hbar m\omega)^{\frac{1}{2}} P \tag{۳۵}$$

در واقع P, Q, H عملگرهای جدیدِ بدون بُعد هستند. همچنین $x_0 = \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{1}{2}}$ دارای بُعدِ طول است و به مقیاسِ طول معروف است. با در نظر گرفتنِ متغیّرهای جدید به آسانی دیده می‌شود که:

$$H = \frac{1}{2}\left(Q^2 + P^2\right)$$

$$[Q, P] = QP - PQ = i$$

اکنون دو عملگر بدون بُعد $a^\dagger, a$ را به طریق زیر تعریف می‌کنیم:

$$\begin{cases} a = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(Q + iP\right) \\ a^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(Q - iP\right) \end{cases} \qquad (۳۷)$$

بنابراین خواهیم داشت:

$$aa^{\dagger} = H + \frac{1}{2}; a^{\dagger}a = H - \frac{1}{2}; \left[a, a^{\dagger}\right] = 1 \qquad (۳۸)$$

همچنین به سادگی مشاهده می‌شود که:

$$\left[a, H\right] = a; \left[a^{\dagger}, H\right] = -a^{\dagger} \qquad (۳۹)$$

عملگرِ $N = a^{\dagger}a$ برخلافِ دو عملگرِ $a^{\dagger}, a$ که هرمیتی نیستند، عملگری هرمیتی است، و به علاوه داریم

$$\left[N, H\right] = \left[a^{\dagger}a, a^{\dagger}a + \frac{1}{2}\right] = 0 \qquad (۴۰)$$

یعنی H , N دارای ویژه کِتِ (ویژه بردار) مشترک هستند. همچنین می‌توان به کمکِ رابطهٔ عملگری $\left[AB, C\right] = A\left[B, C\right] + \left[A, C\right]B$ نشان داد:

$$\left[N, a\right] = -a; \left[N, a^{\dagger}\right] = a^{\dagger}$$

به عنوانِ تمرین نشان دهید که در حالتِ کلّی داریم:

$$\left[a, a^{\dagger^{n}}\right] = n a^{\dagger^{n-1}} \qquad (۴۱)$$

اکنون بر می‌گردیم به مسألهٔ نوسانگرِ هارمونیک و شیوهٔ عملگری فوق را در بارهٔ آن به‌کار می‌بریم. منظورِ ما یافتنِ ε_n, ψ_n در معادلهٔ شرودینگر است، به‌طوری‌که

$$H\psi_n\left(x\right) = \varepsilon_n \psi_n\left(x\right) \qquad \text{یا} \qquad H\left|n\right\rangle = \varepsilon_n \left|n\right\rangle$$

که در آن ψ_n ویژه تابعِ وابسته به ویژه مقدارِ ε_n است (و یا $\left|n\right\rangle$ ویژه کِتِ وابسته به ε_n است.) به راحتی، با توجّه به خواصِّ بنیادی فضای هیلبرت مشاهده می‌شود که:

$$\left\langle a\psi_n \middle| a\psi_n \right\rangle = \left\langle \psi_n \middle| a^{\dagger}a\psi_n \right\rangle = \left\langle \psi_n \middle| H - \frac{1}{2}\psi_n \right\rangle = \left(\varepsilon_n - \frac{1}{2}\right)\left\langle \psi_n \middle| \psi_n \right\rangle \geq 0 \qquad ()$$

و چون $\left\langle \psi_n \middle| \psi_n \right\rangle$ نیز همواره بزرگتر از صفر یا مساوی آن است (چرا؟)، پس خواهیم داشت:

$$\varepsilon_n - \frac{1}{2} \geq 0 \Rightarrow \varepsilon_n \geq \frac{1}{2} \qquad (۴۲)$$

و اگر $\varepsilon_n = \frac{1}{2}$ باشد (که آن را به حالتِ زمینه یا بنیادی نوسانگر- حالتِ خلاء- نسبت می‌دهیم)، نتیجه می‌شود که $a\psi_0 = 0$ است. از سوی دیگر می‌توان نوشت:

$$aH\psi_n - Ha\psi_n = [a,H]\psi_n = a\psi_n = a\varepsilon_n\psi_n - Ha\psi_n$$
$$\Rightarrow Ha\psi_n = (\varepsilon_n - 1)a\psi_n \qquad (۴۳)$$

به همین ترتیب می‌توان رابطهٔ زیر را به‌دست آورد:

$$Ha^\dagger\psi_n = (\varepsilon_n + 1)a^\dagger\psi_n \qquad (۴۴)$$

یعنی: چنانچه ψ_n ویژه تابعِ H وابسته به ویژه مقدارِ ε_n باشد، $a\psi_n$ ویژه تابعِ H با ویژه مقدارِ $(\varepsilon_n - 1)$ خواهد بود (به شرطِ این‌که $a\psi_n \neq 0$ باشد)، و $a^\dagger\psi_n$ ویژه تابعِ H با ویژه مقدارِ $(\varepsilon_n + 1)$ است. بنابراین اگر ویژه تابعِ وابسته به ویژه مقدارِ $\varepsilon_0 = \frac{1}{2}$ را بشناسیم (این تابعِ بهنجار را با ψ_0 یا $|0\rangle$ نمایش می‌دهیم و حالتِ زمینه یا بنیادی، و یا حالتِ خلأ می‌نامیم)، با اثر دادنِ متوالی $a^\dagger$ روی آن همهٔ ویژه توابع را می‌توانیم به‌دست آوریم. جدولِ ویژه توابع و ویژه مقادیرِ وابسته به آن به‌صورتِ زیر خلاصه می‌شود:

تابعِ ویژه ψ_n	ψ_0 یا $\lvert 0\rangle$	$(a^\dagger)\psi_0$	$(a^\dagger)^2\psi_0$	$(a^\dagger)^3\psi_0$	.....	$(a^\dagger)^n\psi_0$ یا $a^{\dagger^n}\lvert 0\rangle$
مقدارِ ویژه ε_n	$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{5}{2}$	$\frac{7}{2}$	.....	$n+\frac{1}{2}$

دیده می‌شود که بینابِ انرژی گسسته و فاصلهٔ میانِ ترازها مقداری ثابت است. به عنوانِ تمرین نشان دهید که ویژه توابعِ بهنجار از رابطهٔ زیر به‌دست می‌آید:

$$\begin{cases} \psi_n \equiv |n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{n!}}a^{\dagger^n}|0\rangle \\ \varepsilon_n = n + \frac{1}{2}; n = 0,1,2,\ldots \end{cases} \qquad (۴۵)$$

بدین ترتیب مشاهده می‌شود که فقط باید ψ_0 را معلوم کنیم. بدین منظور از روابطِ زیر کمک می‌گیریم:

$$\begin{cases} a^\dagger \psi_n = (n+1)^{\frac{1}{2}} \psi_{n+1} \\ a\psi_n = n^{\frac{1}{2}} \psi_{n-1} \end{cases}$$

اثباتِ این روابط به راحتی امکان‌پذیر است. روابطِ فوق در واقع مبیّنِ این نکته است که ترازهای انرژی نوسانگرِ هارمونیک غیرِ دژنره (غیرِ تبهگن[۵]) است.

اکنون برای یافتنِ ψ_0 از این خاصّیت کمک می‌گیریم که به ازای $n=0$ دریافتیم که $a\psi_0 = 0$ است. همچنین

$$p = -i\hbar\frac{d}{dx} = -i\hbar\frac{d}{dQ}.\frac{dQ}{dx} = -i\hbar\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\frac{d}{dQ} = (\hbar m\omega)^{\frac{1}{2}}P \Rightarrow P = -i\frac{d}{dQ}$$

بنابراین،

$$a\psi_0 = 0 \Rightarrow (Q+iP)\psi_0 = 0 \Rightarrow \left(Q+\frac{d}{Q}\right)\psi_0 = 0 \Rightarrow \psi_0(Q) = Ae^{\frac{-Q^2}{2}} \qquad (۴۶)$$

شرطِ بهنجارش، ضریب A را به‌دست می‌دهد: $A = \pi^{\frac{-1}{4}}$. از طرفِ دیگر در بالا دیدیم که برای ویژه توابعِ بهنجارِ ψ_n خواهیم داشت:

$$\psi_n(Q) = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(a^\dagger\right)^n\psi_0(Q) = \frac{1}{\sqrt{n!}}\frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n}}\left(\frac{d}{dQ}-Q\right)^n\psi_0(Q) \qquad (۴۷)$$

از اتّحادِ زیر که برای تابعِ اختیاری مشتق پذیرِ $f(Q)$ برقرار است کمک گرفته و رابطهٔ بالا را به شکلی مناسب می‌نویسیم:

$$\begin{aligned} &\left(\frac{d}{dQ}-Q\right)f(Q) \equiv e^{\frac{Q^2}{2}}\frac{d}{dQ}\left(e^{-\frac{Q^2}{2}}f(Q)\right) \\ &\Rightarrow \psi_n(Q) = \frac{(-1)^n\pi^{\frac{-1}{4}}}{\sqrt{2^n n!}}e^{\frac{Q^2}{2}}\frac{d^n}{dQ^n}e^{-Q^2} \end{aligned} \qquad (۴۸)$$

و بالاخره به‌کمکِ عبارت زیر که به چند جمله‌ای درجهٔ n هرمیت معروف است، توابعِ موج را برحسبِ این چند جمله‌ای‌ها می‌نویسیم. نتیجه چنین می‌شود:

---

[۵] - Nondegenerate

$$H_n(Q) = (-1)^n e^{Q^2} \frac{d^n}{dQ^n} e^{-Q^2}$$
$$\Rightarrow \psi_n(Q) = \frac{\pi^{-\frac{1}{4}}}{\sqrt{2^n n!}} e^{\frac{-Q^2}{2}} H_n(Q) \qquad (۴۹)$$

و یا برحسبِ متغیّر اصلی x، خواهیم داشت:

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} e^{\frac{-1}{2}\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)x^2} H_n\left(x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right) \qquad (۵۰)$$

و یا برحسبِ x و مقیاسِ طول $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$،

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}\, 2^n n!}} \frac{1}{x_0^{n+\frac{1}{2}}} \left(x - x_0^2 \frac{d}{dx}\right)^n \exp\left(\frac{-x^2}{2x_0^2}\right) \qquad (۵۱)$$

و انرژی E_n نیز چنین می‌شود:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega; n = 0,1,2,\ldots$$

این نتیجه در فیزیکِ جدید و مکانیکِ کوانتومی اهمّیت ویژه‌ای دارد و فرض‌های پلانک و اینشتین را دربارهٔ تشعشعِ جسمِ سیاه و فوتوالکتریک تأیید می‌کند و نیز تأییدی بر فرضیهٔ دبای- اینشتین دربارهٔ گرمای ویژه هست. مشاهده می‌شود که انتقالِ انرژی پیوسته نبوده بلکه به‌صورتِ واحدهای $\hbar\omega$ است (و این همان فرضیهٔ پلانک است). نکتهٔ دوّم این‌که انرژی زمینه (حالتِ بنیادی، $n = 0$) صفر نیست و پایین‌ترین ترازِ انرژی $\frac{1}{2}\hbar\omega$ است. این نیز نتیجه‌ای از اصلِ نایقینی است، که می‌توان نشان داد انرژی پایین‌ترین ترازِ نوسانگرِ هارمونیک $\frac{1}{2}\hbar\omega$ است (به مسائلِ پایانِ همین فصل مراجعه کنید).

۴-۲-۳. عملگرهای افزاینده و کاهنده (خَلق و نابودی):

عملگرهای $a, a^\dagger$ در مکانیکِ کوانتومی اهمّیت ویژه‌ای دارند. تاکنون با عملگرهایی سر و کار داشته‌ایم که مشاهداتِ فیزیکی را بیان می‌کردند. مثلاً عملگرِ $H = a^\dagger a + \frac{1}{2} = aa^\dagger - \frac{1}{2}$ که

انرژی نوسانگرِ هارمونیک را به‌دست می‌دهد. امّا در بخشِ قبلی دیدیم که عملگرهای $a, a^\dagger$ عملگرهایی هستند که یک عملِ فیزیکی را انجام می‌دهند، یعنی باعث می‌شوند که ترازِ انرژی بالا رفته یا پایین بیاید. به بیانِ دیگر، این عملگرها باعثِ تغییرِ حالتِ سیستم می‌شوند. در این تغییرِ حالت، انرژی به‌صورتِ واحدهای $\hbar\omega$ تولید شده یا از بین می‌رود. به همین دلیل عملگرهای $a, a^\dagger$ را به ترتیب عملگرهای افزاینده یا خَلق[۶] و کاهنده یا نابودی[۷] می‌نامند و در تمام بخش‌های مکانیک کوانتومی و نظریهٔ میدان کاربرد بسیار دارند. مجموعهٔ این دو عملگر را عملگرهای نردبانی[۸] می‌نامیم.

۴ – ۳. توابع لاگر و لاگر وابسته:

یکی از روش های تعریف چند جمله ایهای لاگر بررسی تابع مولد لاگر است. این تابع را در زیر تعریف می کنیم:

$$g(x,t) = e^{-\frac{xt}{1-t}} = \sum_{n=0}^{\infty} L_n(x) t^n \; ; \qquad (۵۲)$$

به راحتی در می یابیم که به ازای $x=0$ خواهیم داشت: $L_n(0)=1$. در روشِ دیگر از رابطهٔ زیر برای تعریف $L_n(x)$ استفاده می کنیم :

$$L_n(x) = \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{e^{-\frac{xt}{1-t}}}{(1-t)^{n+1}} dt \; ; \qquad (۵۳)$$

رابطهٔ فوق را می توان از تابعِ مولّد به دست آورد. بدین منظور رابطهٔ (۵۲) را در t^{-n-1} ضرب می کنیم و حولِ مبدأ انتگرال می گیریم. فقط جملهٔ t^{-1} باقی می مانَد (طبقُ قضّیهٔ مانده ها). بر همین پایه است که $g(x,t)$ را به عنوانِ تابعِ مولّدِ چند جمله ای لاگر می پذیریم.

اکنون تبدیلِ $\frac{xt}{1-t} s - x \Rightarrow t = \frac{s-x}{s}$ را در رابطهٔ (۵۳) اِعمال می کنیم. نتیجهٔ زیر حاصل می گردد:

---

[۶]- Creation

[۷]- Annihilation

[۸]- Ladder operators

$$L_n(x)=\frac{e^x}{2\pi i}\oint\frac{s^n e^{-s}}{(s-x)^{n+1}}ds; \qquad (۵۴)$$

پربَند جدیدی در صفحهٔ s انتخاب می کنیم که نقطهٔ $s=x$ را در برگیرد. بنا بر فرمولِ انتگرالِ کوشی برای مشتق ها داریم:

$$L_n(x)=\frac{e^x}{n!}\frac{d^n}{dx^n}\left(x^n e^{-x}\right); \qquad n\varepsilon N$$

رابطه فوق فرمولِ رودریگرز برای چند جمله ایهای لاگر است.

با مشتق گیری از تابعِ مولّد (۵۲) نسبت به x و t روابط بازگشتی زیر نتیجه می شود:

$$\begin{cases}(n+1)L_{n+1}(x)=(2n+1-x)L_n(x)-nL_n(x)\\ xL_n'(x)=nL_n(x)-nL_{n-1}(x)\end{cases}; \qquad (۵۵)$$

چنانچه عمل مشتق گیری را ادامه دهیم، با محاسبه ای کوتاه معادلهٔ دیفرانسیلِ لاگر به صورتِ زیر نتیجه می شود:

$$xL_n''(x)+(1-x)L_n'(x)+xL_n(x)=0; \qquad (۵۶)$$

معادلهٔ فوق خودالحاقی نیست و در نتیجه $L_n(x)$ خود به خود مجموعه ای متعامد نمی سازد. امّا با روشِ استانداردِ موجود و تعیینِ تابعِ وزنِ $e^{-x/2}$ معادلهٔ هرمیتی تشکیل و در نتیجه خاصیّتِ اورتونرمالیزاسیون (راست هنجاری) توابعِ لاگر به شکلِ زیر به دست می آید:

$$\int_0^\infty e^{-x}L_m(x)L_n(x)dx=\delta_{mn}$$

بدین ترتیب برای تعریفِ توابعِ متعامدِ لاگر با تابعِ وزنِ واحد، تعریفِ زیر را به کار می گیریم:

$$\varphi_n(x)=e^{-x/2}L_n(x)$$

و در نهایت، معادلهٔ دیفرانسیل برای تابعِ جدید $\varphi_n(x)$ چنین می شود:

$$x\varphi_n''(x)+\varphi_n'(x)+\left(n+\frac{1}{2}-\frac{x}{4}\right)\varphi_n(x)=0; \qquad (۵۷)$$

این معادله شکلِ هرمیتی اشتورم ـ لیوویل را داراست.شرایط مرزی در نظریهٔ اشتورم ـ لیوویل ایجاب می کند که فاصلهٔ تغییراتِ x را $0\le x\prec\infty$ انتخاب کنیم.

۴ – ۳ – ۱. چند جمله ای وابستهٔ لاگر:

در بسیاری از کاربردها به ویژه در مکانیک کوانتومی، که در بخشِ بعدی به آن می پردازیم، لازم است چند جمله ای وابستهٔ لاگر را تعریف کنیم:

$$L_n^k(x) = (-1)^k \frac{d^k}{dx^k}\left[L_{n+k}(x)\right] = \sum_{m=0}^{n} (-1)^m \frac{(n+k)!\,x^m}{(n-m)!(m+k)!m!}; \quad k \succ -1; \ (۵۸)$$

روابط زیر را به راحتی می توان نتیجه گرفت:

$$L_0^k(x) = 1; \quad L_1^k(x) = -x + k + 1; \quad L_2^k(x) = \frac{x^2}{2} - (k+2)x + \frac{(k+1)(k+2)}{2}$$

تابعِ مولّد مربوط به چند جمله ای وابستهٔ لاگر به صورتِ زیر تعریف می شود:

$$\frac{e^{\frac{-xt}{(1-t)}}}{(1-t)^{k+1}} = \sum_{n=0}^{\infty} L_n^k(x)\,t^n; \quad |t| \prec 1; \qquad (۵۹)$$

و از آنجا،

$$L_n^k(0) = \frac{(n+k)!}{n!k!}$$

فرمولِ رودریگرز برای چند جمله ای وابستهٔ لاگر چنین خواهد بود:

$$L_n^k(x) = \frac{e^x x^{-k}}{n!} \frac{d^n}{dx^n}\left[e^{-x} x^{n+k}\right]; \qquad (۶۰)$$

و رابطهٔ تعامد بین این چند جمله ایها،

$$\int_0^\infty e^{-x} x^k L_n^k(x) L_m^k(x)\,dx = \frac{(m+k)!}{n!}\delta_{mn}$$

معادلهٔ دیفرانسیل مربوط به این چند جمله ایها نیز به شکلِ زیر استخراج می شود:

$$xL_n^{k\prime\prime}(x) + (k+1-x)L_n^{k\prime}(x) + nL_n^k(x) = 0; \qquad (۶۱)$$

۴- ۴. بررسی بخش شعاعی معادله شرودینگر برای اتم هیدروژن:

اکنون برای فهمِ بیشتر چند جمله ای لاگر و وابستهٔ آن، مهمترین کاربردِ آن در فیزیکِ کوانتومی، یعنی بخشِ شعاعی اتمِ هیدروژن را مرور می کنیم.

نظریهٔ بور دربارهٔ اتم‌های شبه هیدروژن نیمه‌کلاسیک است و همان‌طور که در پیش بدان اشاره کردیم توجیه رضایت بخشی از پدیده‌های اتمی به‌دست نمی‌دهد. به علاوه در چارچوبِ نظریهٔ بور بررسی خواصِّ اتم‌هایی که بیش از یک الکترون دارند امکان‌پذیر نیست. نظریهٔ موجی شرودینگر این اشکالات را دربر ندارد. از آن‌جا که مسألهٔ اتم‌های شبه هیدروژن را به‌طورِ کامل می‌توان حل کرد (نظیرِ نوسانگرِ هارمونیک)، آن را در این بخش بررسی می‌کنیم.

۴ -۴ – ۱. ویژه توابع و ویژه مقادیر:

انرژی پتانسیل میانِ الکترون و هسته در اتم‌های شبه هیدروژن در دستگاه گاوس[۹] به‌صورتِ زیر است:

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} \qquad (۶۲)$$

در رابطهٔ فوق Z تعدادِ پروتون‌های هستهٔ اتم است که در موردِ اتمِ هیدروژن Z=۱ است. می‌بینیم که این یک پتانسیلِ مرکزی است (به زوایا بستگی ندارد). بدین ترتیب نظریهٔ اتم‌های شبه هیدروژن مثالِ مناسبی از حرکت در یک میدانِ مرکزی است. مبدأ مختصّات را بر مرکزِ هسته منطبق می‌گیریم. معادلهٔ شرودینگر در سه بُعد را در دو سیستمِ دکارتی و کروی می‌توان بررسی کرد، امّا به ویژه هنگامی که پتانسیلِ مرکزی مطرح می‌شود به دلیلِ وجودِ تقارنِ کروی بهتر است آن را در دستگاه کروی حل کرد.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r},t) + V(\vec{r},t)\psi(\vec{r},t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t)$$

$$\psi(\vec{r},t) = \psi(\vec{r})e^{-iEt/\hbar}$$

به‌طوری‌که $\psi(\vec{r})$ پاسخِ معادلهٔ شرودینگر مستقل از زمان است (به‌صورتِ $H\psi = E\psi$):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r}) + V(r)\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

چنانچه ...+$V(r) = V_x(x)$ باشد، می‌توان معادله را با شیوهٔ جداسازی متغیرها حل کرد. با این تکنیکِ جداسازی، معادلهٔ شرودینگر سه بُعدی به سه معادلهٔ یک بُعدی تبدیل می‌شود. لازم

---

[۹]- Gauss

به یادآوری است که برخلافِ مسائلِ یک بُعدی، در سه بُعد اغلب تبهگنی وجود دارد که آن هم زمانی روی می‌دهد که پتانسیل نوعی تقارن را نشان دهد.

اکنون به حلِّ بخشِ شعاعی معادلهٔ شرودینگر می‌پردازیم:

$$\left[\nabla_r^2+\left(k^2-\frac{\lambda}{r^2}\right)\right]R(r)=0 \qquad (۶۴)$$

که در آن

$$k^2=\frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E-V(r)\right]$$

ویژگی این نوع پتانسیل‌های مرکزی در این است که

$$\lim_{r\to 0} r^2V(r)=0$$

یعنی پتانسیل آهسته‌تر از $\frac{1}{r^2}$ به صفر می‌رود (مثلاً نهایتاً به‌صورتِ $\frac{1}{r}$ ظاهر می‌شود که خود آهسته‌تر از $\frac{1}{r^2}$ صفر می‌شود). علّتِ این شرط این است که در $r\to 0$ بتوانیم از جملهٔ $V(r)$ در مقابلِ جملهٔ بعدی که $\frac{1}{r^2}$ دارد صرف‌نظر کنیم. به عبارتِ دیگر، این جمله به اندازهٔ $\frac{1}{r^2}$ در مبدأ دارای ویژگی نیست. همچنین باید این پتانسیل‌ها چنان باشند که در بی‌نهایت سریعتر از $\frac{1}{r}$ به صفر بروند. خودِ پتانسیلِ کولن مستثنی است.

$$\left\{\nabla_r^2+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E+\frac{Ze^2}{r}-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\ell(\ell+1)\right]\right\}R(r)=0 \qquad (۶۵)$$

جملهٔ زیر را پتانسیلِ مؤثّر[۱۰] می‌نامیم:

$$V_{eff}=-\frac{Ze^2}{r}+\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\ell(\ell+1)=V(r)+\frac{L^2}{2\mu r^2} \qquad (۶۶)$$

جملهٔ نخستِ این رابطه پتانسیلِ کولنی و جملهٔ دوّم آن مربوط به نیروی مجازی گریز از مرکز است. معادلهٔ بالا را می‌توانیم به شکلِ زیر بنویسیم:

---

[۱۰]- Effective potential

$$\nabla_r^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}$$

$$\Rightarrow \frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} + \left[-A + \frac{2B}{r} - \frac{1}{r^2}\ell(\ell+1)\right]R(r) = 0$$

که در آن،

$$A = -\frac{2\mu}{\hbar^2}E = \frac{2\mu}{\hbar^2}|E| > 0; \qquad E < 0$$

چون حالتِ وابسته یا مقیّد (اتمِ هیدروژن) را بررسی می‌کنیم، انرژی منفی است. همچنین

$$B = \frac{\mu Z e^2}{\hbar^2} > 0$$

با روشی که معمولاً متداول است به‌جای متغیّرِ r از متغیّرِ بدون بُعد $\rho = 2\sqrt{A}r$ استفاده می‌کنیم (تحقیق کنید که ρ بدونِ بُعد است).

$$\rho = 2\sqrt{A}r = 2\left(\frac{2\mu|E|}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} r$$

بدین ترتیب معادلهٔ شعاعی به‌صورتِ زیر در می‌آید:

$$R'' + \frac{2}{\rho}R' + \left[-\frac{1}{4} + \frac{B}{\sqrt{A}\rho} - \frac{1}{\rho^2}\ell(\ell+1)\right]R = 0 \qquad (۶۷)$$

ضریبِ بدون بُعدِ $\lambda = \frac{B}{\sqrt{A}}$ را بررسی می‌کنیم:

$$\lambda = \frac{B}{\sqrt{A}} = \frac{\mu Z\, e^2/\hbar^2}{\left(-\frac{2\mu}{\hbar^2}E\right)^{\frac{1}{2}}} = \frac{Ze^2}{\hbar}\left(\frac{\mu}{2|E|}\right)^{\frac{1}{2}} = Z\alpha\left(\frac{\mu c^2}{2|E|}\right)^{\frac{1}{2}}$$

که در آن $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}$ ثابتِ ساختمانِ ریز است. با این نحوهٔ نگاه به‌نظر شکلِ نسبیتّی نیز خود را نشان می‌دهد، هر چند در بررسی اصلی، نگاه غیرنسبیّتی مدّ نظر است، از این‌رو در روابطِ اصلی نقشِ c ظاهر نمی‌شود.

در حلِّ معادلهٔ (۶۰)، نخست حالت‌های مجانبی را بررسی می‌کنیم. این حالت‌ها در واقع وارد کردنِ شرطِ فیزیکی و تحمیلِ آن به پاسخِ اصلی معادلهٔ دیفرانسیل است.

۴-۴-۲. خواصِّ مجانبی:

الف) $\rho \to \infty \Rightarrow R_\infty \to 0$

ب) $\rho \to 0 \Rightarrow R_0 =$ مقدارِ معین و غیرِ بی‌نهایت

به ترتیب دو مرحلهٔ مجانبی را بررسی می‌کنیم:

الف) برای $\rho \to \infty$، معادله به شکلِ زیر در می‌آید:

$$R''_\infty - \frac{1}{4}R_\infty \approx 0 \Rightarrow R_\infty = C_1 e^{\frac{-1}{2}\rho} + C_2 e^{\frac{1}{2}\rho} \qquad (۶۸)$$

برای پاسخِ پذیرفتنی فیزیکی $\begin{pmatrix} R_\infty \to 0 \\ \rho \to \infty \end{pmatrix}$، باید $C_2 = 0$ شود. ضریبِ C_1 را عملِ بهنجارش معلوم می‌کند؛ از این‌رو فعلاً آن را وارد نمی‌کنیم. پس

$$R_\infty(\rho) = e^{\frac{-1}{2}\rho}$$

ب) برای $\rho \to 0$، جملاتِ مؤثّرِ[۱۱] معادله به‌صورتِ زیر در می‌آیند:

$$R''_0 + \frac{2}{\rho}R'_0 - \frac{1}{\rho^2}\ell(\ell+1)R_0 = 0$$

پاسخی به‌صورتِ $R_0 = \rho^\alpha$ در نظر می‌گیریم (چون کافی است در این مورد پاسخی خصوصی بیابیم، می‌توان ρ^α را به عنوانِ جملهٔ عمومی بسط سری $\sum_n a_n \rho^n$ در نظر گرفت).

$$R_0 = \rho^\alpha \Rightarrow R'_0 = \alpha\rho^{\alpha-1} \Rightarrow R''_0 = \alpha(\alpha-1)\rho^{\alpha-2}$$
$$\Rightarrow \alpha(\alpha-1)\rho^{\alpha-2} + 2\alpha\rho^{\alpha-2} - \ell(\ell+1)\rho^{\alpha-2} = 0 \Rightarrow \alpha(\alpha+1) = \ell(\ell+1)$$
$$\Rightarrow \begin{cases} \alpha_1 = \ell \\ \alpha_2 = -\ell-1 \end{cases}$$

بنابراین،

$$R_0 = D_1\rho^\ell + D_2\rho^{-(\ell+1)}$$

ρ^ℓ را پاسخِ عادّی می‌گوییم، و $\rho^{-(\ell+1)}$ را پاسخِ غیرعادّی. در پاسخِ قابلِ قبول باید $D_2 = 0$ باشد و D_1 را نیز در ضریبِ کلّی بهنجارش وارد می‌کنیم. بنابراین

$$R_0(\rho) = \rho^\ell$$

---

[۱۱]- Leading term

«یادآور می‌شویم که این وابستگی $R_0 = \rho^{\ell}$ در واقع برای تمامِ پتانسیل‌هایی که در شرطِ $\lim_{r\to 0} r^2 V(r) = 0$ صدق می‌کنند برقرار است»

اکنون تغییرِ تابعِ $f = \rho R$ را به‌کار می‌بریم تا جملهٔ مربوط به R' حذف شود. در نتیجه خواهیم داشت:

$$f = \rho R \Rightarrow R = \frac{f}{\rho} \Rightarrow R' = \frac{f'}{\rho} - \frac{1}{\rho^2} R \Rightarrow R'' = \frac{f''}{\rho} - \frac{2}{\rho^2} f' + \frac{2}{\rho^3} f$$

$$\Rightarrow \frac{f''}{\rho} - \frac{2}{\rho^2} f' + \frac{2}{\rho^3} f + \frac{2}{\rho}\left(\frac{f'}{\rho} - \frac{1}{\rho^2} f\right) + \left[-\frac{1}{4} + \frac{B}{\sqrt{A}\rho} - \frac{1}{\rho^2}\ell(\ell+1)\right]\frac{f}{\rho} = 0$$

$$\Rightarrow f'' + \left[-\frac{1}{4} + \frac{B}{\sqrt{A}\rho} - \frac{1}{\rho^2}\ell(\ell+1)\right] f = 0 \qquad (۶۹)$$

۴-۳. پاسخِ عمومی بخشِ شعاعی:

پاسخ عمومی و کلّی بخشِ شعاعی را به شکلِ زیر در نظر می‌گیریم:

$$R(\rho) = R_\infty R_0 u(\rho)$$

در این صورت خواهیم داشت:

$$f = \rho R = \rho^{\ell+1} e^{\frac{-1}{2}\rho} u = vu \qquad ; \qquad v = \rho^{\ell+1} e^{\frac{-1}{2}\rho}$$

با در نظر گرفتنِ رابطهٔ فوق، معادلهٔ دیفرانسیل (۶۹) به‌صورتِ زیر حاصل می‌شود:

$$f' = v'u + u'v \Rightarrow f'' = u''v + 2u'v' + uv''$$

$$u''v + 2u'v' + uv'' + \left[-\frac{1}{4} + \frac{B}{\sqrt{A}\rho} - \frac{1}{\rho^2}\ell(\ell+1)\right] uv = 0$$

$$u'' + 2u'\frac{v'}{v} + \left[\frac{v''}{v} - \frac{1}{4}\frac{B}{\sqrt{A}\rho} - \frac{1}{\rho^2}\ell(\ell+1)\right] u = 0 \qquad (۷۰)$$

امّا،

$$v = \rho^{\ell+1} e^{\frac{-1}{2}\rho} \Rightarrow v' = -\frac{1}{2} e^{\frac{-\rho}{2}} \rho^{\ell+1} + (\ell+1)\rho^{\ell} e^{\frac{-1}{2}\rho} = \left(\frac{-1}{2} + \frac{\ell+1}{\rho}\right) v$$

$$\Rightarrow v'' = \left(-\frac{1}{2}+\frac{\ell+1}{\rho}\right)v' + \left(-\frac{\ell+1}{\rho^2}\right)v = \left(\frac{-1}{2}+\frac{\ell+1}{\rho}\right)^2 v - \frac{\ell+1}{\rho^2}v$$

$$= \left[-\frac{1}{\rho^2}(\ell+1) + \left(-\frac{1}{2}+\frac{\ell+1}{\rho}\right)^2\right]v$$

با استفاده از این روابط، معادلهٔ دیفرانسیلِ آخر به معادلهٔ زیر تبدیل می‌شود:

$$u'' + 2u'\left(-\frac{1}{2}+\frac{\ell+1}{\rho}\right) + \left\{\left[-\frac{1}{\rho^2}(\ell+1) + \left(\frac{-1}{2}+\frac{\ell+1}{\rho}\right)^2\right] - \frac{1}{4} + \frac{B}{\sqrt{A}\rho} - \frac{1}{\rho^2}\ell(\ell+1)\right\}u = 0$$

$$\Rightarrow u'' + \frac{1}{\rho}\left[2(\ell+1)-\rho\right]u' + \frac{1}{\rho}\left(\frac{B}{\sqrt{A}} - \ell - 1\right)u = 0$$

$$\Rightarrow \rho u'' + \left[2(\ell+1)-\rho\right]u' + \left(\frac{B}{\sqrt{A}} - \ell - 1\right)u = 0 \qquad (۷۱)$$

با توجّه به خواصِ مجانبی تابعِ $R(\rho)$ باید شرایطی را بیابیم که تحتِ آن شرایط تابعِ u به‌صورتِ چند جمله‌ای درجهٔ k در آید. علّت این است که اگر u چند جمله‌ای محدود نباشد در نقاطِ مجانبی مثلاً $\rho \to \infty$ محدود نمی‌شود (به عبارتِ دیگر تابعِ موج در بی‌نهایت خوش‌رفتار نخواهد شد) و واگرا می‌شود و شرطِ فیزیکی $R(\rho)$ را بر هم می‌زند. پس نخست پاسخِ معادلهٔ فوق را به‌صورتِ سری جستجو می‌کنیم:

$$u = \sum_{v=0}^{\infty} a_v \rho^v \Rightarrow u' = \sum_{v=1}^{\infty} v a_v \rho^{v-1} \Rightarrow u'' = \sum_{v=2}^{\infty} v(v-1) a_v \rho^{v-2}$$

$$\sum \rho^v \left\{ a_v\left(\frac{B}{\sqrt{A}} - \ell - 1 - v\right) + a_{v+1}\left[v(v+1) + 2(v+1)(\ell+1)\right]\right\} = 0$$

$$\Rightarrow a_{v+1} = \frac{v+\ell+1-B/\sqrt{A}}{(v+1)(v+2\ell+2)}a_v$$

و برای vهای بسیار بزرگ، $\frac{a_v+1}{a_v} \approx \frac{1}{v}$. با فرضِ $a_{k+1}=0, a_k \neq 0$ به نتیجه زیر می‌رسیم:

$$\frac{B}{\sqrt{A}} = \ell + 1 + k = n$$

علّت این است که همانندِ نوسانگرِ هارمونیک $R(\rho)$ در بی‌نهایت خوش‌رفتار نخواهد بود مگر این‌که سری u در حدّی ختم شود یعنی به چند جمله‌ای تبدیل شود.

$$\frac{B}{\sqrt{A}} = n = Z\alpha\left(\frac{\mu c^2}{2|E|}\right)^{\frac{1}{2}} = Z\alpha\left(\frac{\mu c^2}{-2E}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$\Rightarrow E_n = -\frac{1}{2}\mu c^2 \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} \qquad (۷۲)$$

این همان رابطهٔ آشنای بور برای انرژی الکترون در مدارِ nام است. انرژی به عددِ کوانتومی ℓ وابسته نیست یعنی برای n معیّن، صرف‌نظر از $(n-1)$ مقدارِ ℓ، تبهگنی داریم که برای هر ℓ معیّن به اندازهٔ $(2\ell+1)$ مقدار برای m تبهگنی وجود دارد. علاوه بر این بر اساسِ تقارنِ کرویِ خاصِّ پتانسیلِ کولنی، یک تبهگنی تصادفی داریم چرا که دلیل موجّهی برای آن نداریم. این خاصّیت می‌تواند مربوط به پتانسیلِ $\frac{1}{r}$ باشد که شکلِ خاصِّ وابستگی پتانسیل است: مدارها شاملِ بیضی‌هایی است که در فضا جهت می‌گیرند و علاوه بر آن حرکتِ تقدیمی دارند. انحرافِ کوچک از $\frac{1}{r}$ سببِ این حرکتِ تقدیمی می‌شود که می‌تواند اختلالِ ناشی از حضورِ جسمِ سوّم (مثلاً ماه در حرکتِ زمین به دورِ خورشید) باشد. در حرکتِ عطارد، انحرافِ $42''$ در هر قرن ناشی از تصحیحِ نسبیتّی است که توسّط نسبیّتِ عمومی اینشتین پیش‌بینی می‌شود و دقیقاً آن فرضیه را تأیید می‌کند. این انحراف به سببِ پیش‌بینی جملهٔ $\frac{1}{r^2}$ است که باید به عبارتِ نیوتنی $\frac{1}{r}$ نیز افزوده شود.

پرسش: «چرا در معادلهٔ دیفرانسیلِ u، در پاسخِ u فقط یک ضریبِ ثابتِ اختیاری وجود دارد، در حالی که معادلهٔ دیفرانسیل مرتبهٔ دوّم است. به بیانِ دیگر، آیا انتخابِ سری مک‌لورن به عنوانِ پاسخ کاری منطقی است؟

پاسخ: از نظرِ ریاضی این پرسش به‌صورتِ ایراد منطقی است، زیرا باید در جستجوی جوابِ این معادله روشِ سری فروبنیوس را انتخاب می‌کردیم ولی چنین نکردیم و از سری مک‌لورن استفاده کردیم. امّا این پاسخ در جوابِ فیزیکی مسأله تأثیری ندارد و محدودیتِ فیزیکی سبب

می‌شود این غفلت اشکالی ایجاد نکند. به بیانِ دیگر، همان‌طور که اکنون نشان می‌دهیم پاسخِ دیگرِ معادله (با انتخابِ ثابتِ دوّم) از روشِ سری فروبنیوس چون فاقدِ شرطِ فیزیکی موردِ نیاز است حذف می‌شود:

$$\rho u'' + [2(\ell+1)-\rho]u' + \left(\frac{B}{\sqrt{A}} - \ell - 1\right)u = 0$$

$$u = \sum_{\alpha=0}^{\infty} a_\alpha \rho^{\alpha+\lambda} \Rightarrow u' = \sum_\alpha (\alpha+\lambda) a_\alpha \rho^{\alpha+\lambda-1}$$

$$\Rightarrow u'' = \sum_\alpha (\alpha+\lambda)(\alpha+\lambda-1) a_\alpha \rho^{\alpha+\lambda-2}$$

$$\Rightarrow \sum_\alpha (\alpha+\lambda)(\alpha+\lambda-1) a_\alpha \rho^{\alpha+\lambda-1} + 2(\ell+1)\sum_\alpha (\alpha+\lambda) a_\alpha \rho^{\alpha+\lambda-1}$$

$$-\sum_\alpha a_\alpha (\alpha+\lambda)\rho^{\alpha+\lambda} + \left(\frac{B}{\sqrt{A}} - \ell - 1\right)\sum_\alpha a_\alpha \rho^{\alpha+\lambda} \equiv 0$$

$$\Rightarrow \sum_\alpha \rho^{\alpha+\lambda}\left\{(\alpha+\lambda+1)(\alpha+\lambda)a_{\alpha+1} + 2(\ell+1)(\alpha+\lambda+1)a_{\alpha+1} - (\alpha+\lambda)a_\alpha + \left(\frac{B}{\sqrt{A}} - \ell - 1\right)a_\alpha\right\} \equiv 0$$

$$\Rightarrow a_{\alpha+1} = \frac{\ell + 1 - \dfrac{B}{\sqrt{A}} + \alpha + \lambda}{(\alpha+\lambda+1)(\alpha+\lambda+2\ell+2)} a_\alpha$$

چون $a_{-1} = 0 \Rightarrow \alpha = -1$، پس برای معادلهٔ نشانه‌ای خواهیم داشت:

$$\alpha = -1 \Rightarrow \lambda = 0, \lambda = -2\ell - 1$$

$$\Rightarrow u = Au_0 + Bu_{-2\ell-1}$$

$$u_0 = \sum_{\alpha=0} a_\alpha \rho^{\alpha+\lambda} = \sum_{\alpha=0} a_\alpha \rho^\alpha \quad \text{قابل قبول}$$

$$u_{-2\ell-1} = \sum_{\alpha=0} a_\alpha \rho^{\alpha+\lambda} = \sum_{\alpha=0} a_\alpha \rho^{\alpha-2\ell-1} = a_0\rho^{-2\ell-1} + a_1\rho^{1-2\ell-1} + \ldots$$

در معادلهٔ $u_{-2\ell-1}$ توجّه شود اگر $\rho = 0$ باشد (یعنی در مبدأ مختصّات) مقدارِ $u_{-2\ell-1}$ بی‌نهایت می‌شود (ℓ مثبت است)، و این خلافِ شرطِ فیزیکی است. زیرا R و نهایتاً ψ در مبدأ باید معلوم و غیر بی‌نهایت باشد. پس از نظرِ فیزیکی باید جوابِ اخیر را حذف کرد و این همان کاری است که از ابتدا و بدون توجّه به این نکته انجام دادیم.

اکنون به ادامهٔ بحثِ پاسخِ معادلهٔ دیفرانسیلِ u می‌پردازیم. از طریقِ رابطهٔ بازگشتی، داریم:

$$a_{k+1}=\frac{k+\ell+1-n}{(k+1)(k+2\ell+1)}a_k=(-1)^{k+1}\frac{n-(k+\ell+1)}{(k+1)(k+2\ell+2)}\cdot\frac{n-(k+\ell)}{k(k+2\ell+1)}\cdots\cdot\frac{n-(\ell+1)}{1.(2\ell+2)}a_0$$

برای تعیینِ ضریبِ ناشناختهٔ a_υ از رابطهٔ بازگشتی[12] استفاده می‌کنیم:

$$u=(-1)^k\left[\rho^k-\frac{k(k+s)}{1!}\rho^{k-1}+\frac{k(k-1)(k+s)(k+s-1)}{2!}\rho^{k-2}+\ldots\right]=$$

$$=\sum_{j=0}^{k}(-1)^{k+j}\rho^{k-j}\frac{k!(k+s)!}{j!(k-j)!(k+s-j)!}$$

در این‌جا $s=2\ell+1$ است. رابطهٔ بالا را چندجمله‌ای وابستهٔ درجهٔ k لاگر[13] می‌نامیم. این چندجمله‌ای را با $L^s{}_k(\rho)$ نمایش می‌دهیم و آن را به شکلِ زیر می‌نویسیم:

$$u=L_k^s(\rho)=e^\rho\rho^{-s}\frac{d^k}{d\rho^k}\left(e^{-\rho}\rho^{k+s}\right) \qquad (۷۳)$$

بنابراین بخشِ شعاعی تابعِ موج به این صورت است:

$$R_{n\ell}=C_{n\ell}e^{-\frac{1}{2}\rho}\rho^\ell L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(\rho) \qquad (۷۴)$$

یادآور می‌شویم که

$$\rho=2r\left(\frac{2\mu|E|}{\hbar^2}\right)^{1/2}=2r\left[\frac{2\mu}{\hbar^2}\times\frac{1}{2}\mu c^2\frac{(Z\alpha)^2}{n^2}\right]^{\frac{1}{2}}=2r\frac{\mu c}{\hbar n}Z\alpha$$

$$=\frac{2Z}{n}r\times\frac{\mu c}{\hbar}\cdot\frac{e^2}{\hbar c}=\frac{2Z}{n}\frac{r}{a_0}$$

که در آن $a_0=\dfrac{\hbar^2}{\mu e^2}=\dfrac{\hbar}{mc\alpha}$ شعاعِ اوّلین مدارِ بور است. ضریبِ $C_{n\ell}$ نیز از طریقِ بهنجارش پیدا می‌شود.

---

[12]- Recurrence Relation

[13]- Laguerre

$$C_{nl}=\left(\frac{Z}{na_0}\right)^{3/2}\left[\frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}\right]^{1/2}$$

پس شکلِ کلّی تابعِ R چنین است:

$$R_{nl}(r)=\left(\frac{2Z}{na_0}\right)^{3/2}\left[\frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}\right]^{1/2}\left(\frac{2Zr}{na_0}\right)^{l}e^{-\left(\frac{Z}{na_0}\right)}L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2Zr}{na_0}\right) \qquad (۷۵)$$

و بالاخره تابعِ موجِ کامل به‌صورتِ زیر نوشته می‌شود:

$$\psi_{n\ell m}(\vec{r},\theta,\varphi)=R_{n\ell}(\vec{r})y_{\ell m}(\theta,\varphi)$$

۴ – ۵. چند جمله ایهای چبی شف:

از چند جمله ایهای معروف که عمدتاً در آنالیزِ عددی کاربرد دارند می توان به چند جمله ایهای (Hyper sphere) نوع اوّل و دوّم چبی شف اشاره کرد. این دسته توابع نیز از جمله چند جمله ایهای فوقِ کروی به شمار می آیند. تابعِ مولّدِ چند جمله ایهای فوقِ کروی به صورتِ زیر تعریف می شود:

$$g(x,t)=\frac{1}{\left(1-2xt+t^2\right)^{\alpha}}=\sum_{n=0}^{\infty}C_n^{(\alpha)}(x)t^n; \quad |x|\prec 1; \quad |t|\prec 1 \qquad (۷۶)$$

یادآور می شویم که به ازای $\alpha=\frac{1}{2}$ چند جمله ای لژاندر نتیجه می شود. با انتخابِ $\alpha=1$ و $\alpha=0$ دو دستهٔ عمده چند جمله ای حاصل می شوند که آنها را چند جمله ایهای چبی شف می نامیم و به طورِ خلاصه ویژگی های آنها را در زیر بیان می کنیم:

نوعِ اوّل چند جمله ای به ازای $\alpha=0$ تعربف می شود. از معادلهٔ (۷۶) نسبت به t مشتق می گیریم:

$$\frac{x-t}{\left(1-2xt+t^2\right)^{\alpha+1}}=\sum_{n=1}^{\infty}\frac{n}{2}\left[\frac{C_n^{(\alpha)}(x)}{\alpha}\right]t^{n-1}; \qquad (۷۷)$$

اکنون $C_n^{(0)}(x)$ را چنین تعریف می کنیم:

$$C_n^{(0)}(x)=\lim_{\alpha\to 0}\frac{C_n^{(\alpha)}(x)}{\alpha}$$

معادلهٔ (۷۷) را در $2t$ ضرب کرده و مقدارِ $1=\frac{1-2xt+t^2}{1-2xt+t^2}$ را به آن اضافه می کنیم. نتیجه چنین می شود:

$$\frac{1-2xt+t^2}{1-2xt+t^2}=1+2\sum_{n=1}^{\infty}\frac{n}{2}C_n^{(0)}(x)t^n$$

حال $T_n(x)$را به صورتِ زیر تعریف می کنیم،

$$T_n(x)=\begin{cases}1;n=0\\ \frac{n}{2}C_n^{(0)}(x);n\succ 0\end{cases}$$

در نتیجه،

$$\frac{1-2xt+t^2}{1-2xt+t^2}=T_0(x)+2\sum_{n=1}^{\infty}\frac{n}{2}T_n(x)t^n$$

$T_n(x)$ را چند جمله ای نوعِ اوّل چبی شف می نامیم. این تابع در محاسباتِ عددی بسیار کاربرد دارد.

نوعِ دوّم چند جمله ای چبی شف در ازای $\alpha=1$ نتیجه می شود:

$$\frac{1}{1-2xt+t^2}=\sum_{n=1}^{\infty}C_n^{(0)}(x)t^n\ ; \qquad (۷۸)$$

این نوع چند جمله ای کاربردِ کمی در ریاضی فیزیک دارد. یک کاربردِ غیر معمولِ استفاده از هارمونیک های کروی چهار بعدی در نظریهٔ اندازه حرکتِ زاویه ای است.

۴ -۵ - ۱. بحثِ پایانی چند جمله ایهای ریاضی ـ فیزیک:

در این بخش یک جمع بندی کلّی از توابعِ خاصِّ گفته شده تا کنون انجام می دهیم. نشان داده می شود که این چند جمله ایها حالتِ خاصّی از چند جمله ایهای متعامد به صورتِ زیر هستند. اغلب توابعی که در ریاضی ـ فیزیک وجود دارند، به دستگاه های متعامد وابسته اند. یک دستگاه از توابع حقیقی $\varphi_n(x)$; $(n=0,1,2,...)$ در بازهٔ $a\le x\le b$ نسبت به تابعِ وزنِ $w(x)$ متعامد نامیده می شوند چنانچه

$$\int_a^b w(x)\varphi_m(x)\varphi_n(x)\,dx=a_m\delta_{mn}; \qquad (۷۹)$$

و اگر شرط $a_m=1$را نیز اضافه کنیم در آن صورت آن را دستگاه متعامدِ بهنجار می نامیم. چند مثال در این مورد مطرح می کنیم:

الف ـ فرض می کنیم

$$a=-1, b=1, w(x)=(1-x)^{\alpha}(1+x)^{\beta}; \alpha \succ -1; \beta \succ -1$$

در این صورت $\varphi_n(x)$ را چند جمله ای ژاکوبی می نامیم و با $P_m^{(\alpha,\beta)}(x)$ نمایش می دهیم.
اگر $\alpha=\beta$ باشد، چند جمله ای فوقِ کروی نتیجه می شود که مواردِ خاصِّ آن چنین است:

۱ ـ فرض می کنیم $\alpha=\beta=-\frac{1}{2}$ باشد. آنگاه،

$$P_n^{(-1/2,-1/2)}(x)=\frac{(2n)!}{2^{2n}(n!)^2}T_n(x); \tag{۸۰}$$

چند جمله ای چبی شف نوعِ اوّل به دست می آید.

۲ ـ چنانچه $\alpha=\beta=0$ باشد، در این صورت $P_n^{(0,0)}(x)=P_n(x)$ و چند جمله ای لژاندر حاصل می شود.

ب ـ اگر $k \succ -1$, $a=0, b=+\infty, w(x)=x^k e^{-x}$ باشد، آنگاه

$$\varphi_n(x)=L_n^k(x)$$

و چند جمله ای لاگر نتیجه می گردد.

۳ ـ فرض می کنیم

$$a=-\infty, b=+\infty, w(x)=e^{-x^2/2}$$

آنگاه $\varphi_n(x)=H_n(x)$ ،که چند جمله ای هرمیت نامیده می شود.

۴ – ۶. چند مسئله حل شده:

I:

$$[a,H]=a$$

$$H=\frac{1}{2}\left(aa^{\dagger}+a^{\dagger}a\right)=aa^{\dagger}-\frac{1}{2}=a^{\dagger}a+\frac{1}{2};\left[a,a^{\dagger}\right]=1$$

$$\Rightarrow [a,H]=\left[a,\frac{1}{2}\left(aa^{\dagger}+a^{\dagger}a\right)\right]=\left[a,aa^{\dagger}-\frac{1}{2}\right]=a\left(aa^{\dagger}-\frac{1}{2}\right)-\left(aa^{\dagger}-\frac{1}{2}\right)$$

$$=aaa^{\dagger}-\frac{a}{2}-aa^{\dagger}a+\frac{a}{2}=aaa^{\dagger}-a\left(aa^{\dagger}-1\right)=aaa^{\dagger}-aaa^{\dagger}+a=a$$

II: $\left[a, a^{\dagger^{n}}\right] = n a^{\dagger^{n-1}}$

برای اثبات از روشِ استقراء استفاده می‌کنیم:

$$\left[a, a^{\dagger}\right] = 1$$
$$\left[a, a^{\dagger^{2}}\right] = \left[a, a^{\dagger} a^{\dagger}\right] = \left[a, a^{\dagger}\right] a^{\dagger} + a^{\dagger}\left[a, a^{\dagger}\right] = 2a^{\dagger}$$

فرض می‌کنیم که رابطه برای توانِ $(n-1)$ برقرار است، آنگاه ثابت می‌کنیم که برای توانِ n نیز برقرار است:

$$\left[a, a^{\dagger^{n-1}}\right] = (n-1) a^{\dagger^{n-2}}$$
$$\Rightarrow \left[a, a^{\dagger^{n-1}}\right] = a a^{\dagger^{n-1}} - a^{\dagger^{n-1}} a = (n-1) a^{\dagger^{n-2}}$$
$$a\left(a a^{\dagger^{n-1}} - a^{\dagger^{n-1}} a\right) = a^{\dagger} (n-1) a^{\dagger^{n-2}} = (n-1) a^{\dagger^{n-1}}$$
$$a^{\dagger} a a^{\dagger^{n-1}} - a^{\dagger^{n}} a = (n-1) a^{\dagger^{n-1}} \; ; \; a^{\dagger} a = a a^{\dagger} - 1$$
$$\Rightarrow \left(a a^{\dagger^{n}} - 1\right) a^{\dagger^{n-1}} - a^{\dagger^{n}} a = (n-1) a^{\dagger^{n-1}}$$
$$a a^{\dagger} - a^{\dagger^{n-1}} - a^{\dagger^{n}} a = (n-1) a^{\dagger^{n-1}} \Rightarrow \left[a, a^{\dagger^{n}}\right] = n a^{\dagger^{n-1}}$$

III. C_n = ضریبِ بهنجارش، $\psi_n = C_n \left(a^{\dagger}\right)^{n} \psi_0$

$$\left\langle \psi_n \middle| \psi_n \right\rangle = \left\langle C_n a^{\dagger^{n}} \psi_0 \middle| C_n a^{\dagger^{n}} \psi_0 \right\rangle = 1$$
$$\left[a, a^{\dagger^{n}}\right] = a a^{\dagger^{n}} - a^{\dagger^{n}} a = n a^{\dagger^{n-1}} \Rightarrow a a^{\dagger^{n}} = a^{\dagger^{n}} a + n a^{\dagger^{n-1}}$$

بنا به قرارداد C_n را عددی حقیقی می‌گیریم.

$$C_n^2 \left\langle a^{\dagger^{n-1}} \psi_0 \middle| \left(a^{\dagger^{n}} a + n a^{\dagger^{n-1}}\right) \psi_0 \right\rangle = C_n^2 \left[\left\langle a^{\dagger^{n-1}} \psi_0 \middle| a^{\dagger^{n}} a \psi_0 \right\rangle + n \left\langle a^{\dagger^{n-1}} \psi_0 \middle| a^{\dagger^{n-1}} \psi_0 \right\rangle\right] = 1$$

توجّه داریم که $a \psi_0 = 0$ است. بنابراین،

$$C_n^2 \times n\left\langle a^{\dagger^{n-1}}\psi_0 \middle| a^{\dagger^{n-1}}\psi_0\right\rangle = \ldots = C_n^2 \times n(n-1)(n-2)\ldots\times 2\times 1\langle\psi_0|\psi_0\rangle = n!\,C_n^2 = 1$$

$$\Rightarrow C_n^2 = \frac{1}{n!} \Rightarrow C_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}$$

$$\Rightarrow \psi_n = C_n a^{\dagger^n}\psi_0 = \left(\frac{1}{n!}\right)^{\frac{1}{2}}\left(a^\dagger\right)^n\psi_0$$

این رابطه خود نشان می‌دهد که ضریبِ n نمی‌تواند منفی باشد، چرا که نُرم کمیتّی مثبت است.

IV- رابطه خاصیت تعامد چند جمله ایهای هرمیت، یعنی رابطه (۶)، را اثبات کنید.

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} H_n(x) H_m(x)\, dx = n!\pi^{1/2} 2^n \delta_{nm}$$

حل ــ از تعریف تابع مولد برای چند جمله ایهای هرمیت کمک می گیریم:

$$g(x,t) = e^{-t^2+2xt} = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x)\frac{t^n}{n!}$$

انتگرال را محاسبه می کنیم:

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-s^2+2sx} e^{-t^2+2xt} e^{-x^2} dx = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{s^n}{n!}H_n(x)\frac{t^m}{m!}H_m(x)e^{-x^2}dx$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{s^n}{n!}\frac{t^m}{m!}\int_{-\infty}^{\infty} H_n(x)H_m(x)e^{-x^2}dx$$

سمتِ چپ رابطهٔ بالا به راحتی حساب می شود:

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\left[x^2+(s+t)^2-2st+2(s+t)x\right]}dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(x+s+t)^2}e^{2st}dx$$

$$= e^{2st}\sqrt{\pi} = \pi^{1/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(2st)^n}{n!}$$

اکنون ضریبِ توان های همانند را در دو طرفِ رابطهٔ اصلی مساوی هم قرار می دهیم؛ نتایج زیر حاصل می گردد:

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n^2(x)e^{-x^2}dx = \pi^{1/2}2^n n!$$
$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(x)H_m(x)e^{-x^2}dx = 0; \qquad n \neq m$$

V ـ فرض می کنیم تابعِ مولّد چند جمله ایهای هرمیت به صورتِ $g(x,t) = e^{-t^2+2xt} = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x)\frac{t^n}{n!}$ داده شده است و مقادیرِ $H_n(x)$ نیز معلوم هستند. اکنون از عبارتِ مذکور نسبت به x مشتق بگیرید و معادلهٔ دیفرانسیلی از مرتبهٔ اوّل برای $g(x,t)$ به دست آورید. سپس کمیّتِ t را ثابت بگیرید و معادله را حل کنید و در نهایت شکلِ نهایی تابعِ مولّد، یعنی $g(x,t) = e^{-t^2+2xt}$ را نتیجه بگیرید.

حل ـ

$$g(x,t) = e^{-t^2+2xt} = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x)\frac{t^n}{n!}$$
$$\frac{\partial g}{\partial x} = \sum_{n=0}^{\infty} H_n'(x)\frac{t^n}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} 2nH_{n-1}(x)\frac{t^n}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} 2\frac{H_{n-1}(x)}{(n-1)!}t^{n-1}.t$$

یادآور می شویم که در عبارتِ بالا از روابط بازگشتی مربوط به توابعِ هرمیت استفاده کرده ایم. در نتیجه،

$$\frac{\partial g(x,t)}{\partial x} = 2tg(x,t)$$

این معادله را حل می کنیم:

$$\frac{dg}{dx} = 2gt \Rightarrow \frac{dg}{g} = 2tdx$$
$$\Rightarrow \ln g = 2tx + c \Rightarrow g(x,t) = e^{2tx}f(t)$$

اکنون ثابت انتگرال گیری $g(0,t)$ را محاسبه می کنیم و با توجّه به روابط $H_{2n}(0) = (-1)^n\frac{(2n)!}{n!}$ و $H_{2n+1}(0) = 0$ خواهیم داشت:

$$g(0,t) = f(t) = \sum H_n(0)\frac{t^n}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} H_{2n}(0)\frac{t^{2n}}{(2n)!} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n t^{2n}}{n!}$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-t^2)^n}{n!} = e^{-t^2} \Rightarrow f(t) = e^{-t^2}$$

بنابراین شکلِ نهایی تابعِ مولّد برای چند جمله ایهای هرمیت چنین خواهد شد:

$$g(x,t) = e^{-t^2+2xt}$$

۴ – ۶. چند مسئله برای حل:

۱ – معادلهٔ دیفرانسیلِ هرمیت $y'' - 2xy' + 2\alpha y = 0$ را از راه سری حل کنید. نشان دهید که با انتخابِ مناسبِ α یکی از دو پاسخ به چند جمله ای تبدیل می شود.

۲ - انتگرالِ وابسته به احتمالِ گذار بینِ دو حالتِ نوسانی m و n، یعنی رابطهٔ زیر را محاسبه کنید. نتیجهٔ این مسئله آن است که گذارهای نوسانی فوق بین حالت های با ترازهای مجاور هم روی می دهد (یعنی $m = n \pm 1$).

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-x^2} H_n(x) H_m(x) dx$$

۳ – الف) نشان دهید که چند جمله‌ای هرمیت درجهٔ n دارای پاریتهٔ $(-1)^n$ است.

ب) نشان دهید که در حالتِ ψ_n داریم،

$$\langle x \rangle = \langle p \rangle = 0$$

$$\Delta x \Delta p = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar \Rightarrow \Delta x \Delta p = \frac{1}{2}\hbar$$

ج) رابطهٔ راست هنجاری زیر را ثابت کنید:

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(x) H_m(x) e^{-x^2} dx = \pi^{1/2} 2^n n! \delta_{nm}$$

$$\left[a, a^{\dagger n}\right] = n a^{\dagger n-1}$$

$$\psi_n = \left(\frac{1}{n!}\right)^{\frac{1}{2}} a^{\dagger n} \psi_0$$

۴ـ روابط (۵۵) را در موردِ چند جمله ایهای لاگر به دست آورید. از آ نجا به کمکِ این روابط معادلهٔ دیفرانسیلِ لاگر، یعنی رابطهٔ (۵۷)، را استخراج کنید.

۵ - از تابعِ مولّد چند جمله ایهای وابستهٔ لاگر، یعنی رابطهٔ (۵۹)، فرمولِ رودریگرز را برای این توابع، یعنی رابطهٔ (۶۰)، را به دست آورید.

۶ - معادلهٔ دیفرانسیلِ چبی شف به صورتِ $\left(1-x^2\right)y''-xy+2\alpha y=0$ است. اگر n عددِ درست (فرد یا زوج) باشد، هر یک از دو پاسخِ خصوصی به چه صورتی در می آیند؟