بسم اللّه الرّحمن الرّحیم

دانشگاه علم و صنعت ایران

دانشکده فیزیک

نمایش فضای فاز در مکانیک کوانتومی

ابراهیم فخری گمچی

پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد

رشته فیزیک – حالت جامد

استاد راهنما: دکتر فاطمه شجاعی

آذر ۱۳۷۹

تقدیم به مادر عزیزم

چکیده

در این پایان نامه یکی از مهمترین ابزارهای حل مسائل مکانیک کوانتومی بروشی ساده تر یعنی روش تبدیلات کانونیک بررسی می شود. این تبدیلات در فضای فاز کوانتومی مطالعه شده اند.همچنین در فصل اوّل مطالعه و بررسی فضای فاز کوانتومی و پارامترهای مهّم آن یکی از مهمترین اهداف ما در این پایان نامه بوده است که شامل مطالعه توابع توزیع فضای فاز به عنوان مهمترین کمیّت این فضا می باشد.در اینجا ما توابع توزیع،تعریف آنها،روابط آنها با یکدیگر ، خواص توابع توزیع و کاربردهای آنها را بررسی کرده ایم.تابع توزیع مورد نظر ما در اینجا تابع توزیع ویگنر بوده است که به علّت سادگی معادلات تحوّل زمانی حاکم بر آن در نظر گرفته شده است.در فصل دوّم تبدیلات کانونیک به طور کلّی تعریف شده اند. مهمترین نکته در این قسمت نحوه اعمال مرتبه بندی است که از مکانیک کوانتومی حاصل می شود و باعث ایجاد تبدیلات کانونیک کوانتومی می گردد.در فصل سوّم هم به بررسی ساختار و فرمول بندی تبدیلات کانونیک از دیدگاههای مختلف همانند تبدیلات کانونیک پایه و تابع مولد و نحوه استفاده از آنها پرداخته شده است. در این پایان نامه دیدگاه تابع مولد اصلی ترین دیدگاه ما بوده است.در فصل چهارم کاربرد تبدیلات کانونیک در حل مسائل چندی از مکانیک کوانتومی(ذره آزاد و نوسانگر هماهنگ) بیان شده است که با تطبیق جوابهای بدست آمده از این روش و جوابهای که از قبل داشتیم توانسته ایم درستی و سهولت این روش را متذکّر شویم.

سپاسگزاری

ضمن سپاس بیکران خداوند لازم می دانم از تمامی اساتید محترمی که در طول دوره مشوق و راهنمای بنده بودند صمیمانه تشکر و قدردانی نمایم.بخصوص از استاد محترم سرکار خانم دکتر فاطمه شجاعی که با ارائه راهنماییهای مدبرانه و دلسوزانه خود سهم بسزایی در تهیه و تدوین این پایان نامه داشته اند با تمام وجود سپاسگزاری می نمایم.همچنین از اعضای محترم هیئت داوری آقایان دکتر ابوالحسنی (داور خارجی) ، دکتر جزایری (داور داخلی) و دکتر قولتوقچیان (مدیر محترم تحصیلات تکمیلی دانشکده فیزیک)صمیمانه تشکر نموده و سپاس خود را به حضورشان تقدیم می دارم.

ابراهیم فخری

فهرست مطالب

فصل سوم : فرمول بندی توابع مولد تبدیلات کانونیک

فصل چهارم : کاربردهای تبدیلات کانونیک در مکانیک کوانتومی

فهرست تصاویر و نمودارها

عنوان **صفحه**

مقدمه

از تبدیلات کانونیک به عنوان یکی از ابزارهای ارزشمند در مکانیک کلاسیک نام برده می شود..ولی این تبدیلات در مکانیک کوانتومی تاکنون کاربرد چندانی نداشته اند.ما در مکانیک کوانتومی بیشترین توجه را به تبدیلات یکانی داریم.این تبدیلات یکانی در مقایسه با تبدیلات کانونیک می توانند به عنوان یک زیر مجموعه از آنها نام برده شوند که مشابه با تبدیلات کانونیک خطی است. با این فرض که تبدیلات یکانی به عنوان تبدیلات کانونیک مطرح باشند(زیرا همانند آنها باعث ناوردا ماندن کروشه دیراک می شوند)می توان تبدیلات کانونیک را در مکانیک کوانتومی هم بکار برد.البته ابن فرض باعث نخواهد شد که ما ازکاربرد تبدیلات کانونیک غیر خطی صرف نظر نماییم.از این تبدیلات کانونیک غیر خطی در مواردی برای حل مسائل استفاده می شود.در تعریف مشابه کوانتومی تبدیلات کانوننیک بایستی به این نکته توجه کرد که چون این تبدیلات در یک فضای فاز کوانتومی هستند و متغییرهای کانونیک ما در این فضا جابجاپذیر نمی باشند ما بایستی در تعریف این تبدیلات مرتبه بندی مناسب ناشی از این عدم جابجایی را در نظر بگیریم.این مرتبه بندی حالت منحصربفردی نداشته و به مسئله ما بستگی خواهد داشت.

فرمولبندی و ایجاد یک ساختار ریاضی برای تبدیلات کانونیک مهمّترین بحث در کاربرد تبدیلات کانونیک است.ما دیدگاههای مختلفی را در فرمول بندی این تبدیلات داریم.از ابن دبدگاهها می توان به تبدیلات کانونیک پایه و تابع مولّد اشاره کرد.در دیدگاه اوّل تبدیلات پایه در مکانیک کلاسیک تعریف می شوند و ما پس از تجزیه تبدیلات کانونیک به این تبدیلات مرتبه بندی مناسب را اعمال کرده و فرم کوانتومی تبدیلات تجزیه شده را بدست می آوریم.در این روش برای حل یک مسئله هامیلتونی را بوسیله تبدیلات کانونیک پایه که عبارتند از تبدیل کانونیک یکسان ،تبدیل کانونیک نقطه ای وتبدیل کانونیک جابجایی به هامیلتونی جزئی تر تبدیل کرد و سپس با بدست آوردن تابع موجی مربوطه دوباره عکس این عمل را انجام داد تا به تابع موجی جواب اصلی رسید.در دیدگاه دوّم با تعریف یک تابع مولّد می توان تبدیلات کانونیک را به صورت یک توان نمایی از این تابع مولّد نشان داد.در این حالت هم با بدست آوردن این تابع مولّد از روشهای مختلف می توان تبدیل کانونیک مورد نظر و همین طور تابع موجی جواب را محاسبه کرد.با پیش فرض های مختلفی می توان به این تابع مولّد رسید.به عنوان مثال در حالتی که هامیلتونیها ناوردا باشند اگر ما متغییرهای موجود در این هامیلتونیها را بر حسب تابع مولّد قرار دهیم به رابطه ای برای تابع مولد خواهیم رسید که با در نظر گرفتن یک جواب تقریبی میتوان تابع مولّد را بدست آورد.با داشتن این تابع مولّد در حالت ناوردایی هامیلتونیها و داشتن توابع موجی جدید یا قدیم(به علّت یکسان بودن هامیلتونیها توابع موجی یکسانی خواهیم داشت)می توان با یک معادله انتگرالی به جواب رسید.در این حالت توابع مولّد فارغ از هر گونه تصحیح کوانتومی خواهند بود.از طرفی

چون در حالت قبلی هامیلتونی ها مشابه هم می باشند ما دارای توابع موجی یکسانی خواهیم بود و یا به عبارتی می توان گفت که تبدیل تاثیری بر این توابع موجی نداشته است.و این تبدیلات تنها برروی توابع توزیع فضای فاز تاثیر گذار خواهند یود(به علّت فرم خاصّ تعریف آنها) و باعث تبدیل آنها به توابع توزیع تبدیل یافته خواهند شد.این قسمت برای ما دارای اهمیّت زیادی می باشد زیرا می توان در معادلات تحوّل زمانی توابع توزیع با استفاده از این تبدیلات به معادله تحوّل زمانی تابع توزیع تبدیل یافته رسید که تحت حالات خاصّی نسبت به معادله قبلی براحتی قابل حل است.از روند عکس این حالت هم می توان تابع توزیع اصلی را بدست آورد.در دیدگاه تابع مولّد ما به بحث هامیلتون -ژاکوبی هم می پردازیم.در این تابع مولّد ما با تابع اصلی هامیلتونی که متناظر با تابع کنش کلاسیکی است جایگزین می شود و توابع تبدیل یافته مقادیر ثابتی خواهند داشت و معادله انتگرالی ما هم براحتی قابل حل خواهد بود(در این مبحث تابع اصلی هامیلتونی دارای تابعیت زمانی است).

با توجّه به بحث بالایی مطالعه توابع توزیع جزو اساسی ترین نیازهای ما خواهد بود.در قسمت قبل گفتیم که چون تبدیلات کانونیک در فضای فاز کوانتومی بررسی می شوند و توابع توزیع فضای فاز هم به عنوان مهمترین پارامتر این فضا مطرح هستند پس مطالعه و بررسی این توابع توزیع در اولویت کار ما قرار خواهد داشت.ما دارای توابع توزیع مختلفی در فضای فاز هستیم که از یک تعریف کلّی که بر مبنای مرتبه بندی و عدم جابجایی متغییرها استوار است تبعیّت می کنند و می توان بنا به کاربرد آنها و نوع مسائل از آنها استفاده کرد.این توابع توزیع که بیان لفظ تابع برای آنها کمی نادرست است (به علّت اصل عدم قطعیت و اینکه متغییرهای ممنتوم و مختصه را در یک نقطه نمی توان تعریف کرد)بیشتر به عنوان توابع شبه احتمال هم معروف هستند.لفظ شبه احتمال از اینجا ناشی می شود که به علّت منفی شدن این توابع در برخی موارد نمی توان آنها را تابع توزیع احتمال نامید.تابع توزیع مورد علاقه ما در این قسمت تابع توزیع ویگنر است.این تابع توزیع دارای ساده ترین معادلات تحوّل زمانی است که این معادلات به فرم کلاسیکی هستند در حالی که سایر معادلات تحوّل زمانی بسیار پیچیده تر خواهند بود و براحتی هم حل نمی شوند.تابع توزیع ویگنر مقادیر منفی هم می تواند داشته باشد.مقادیر منفی را این گونه می توان تعبیر کرد که اگر ما پدیده تداخل را در نظر بگیریم بیان کوانتومی این پدیده می تواند منفی بودن این تابع توزیع را برای ما آشکار سازد (در ابنجا منفی از جملات تداخلی ناشی می شود که فرم نوسانی هم دارند). عمده ترین و مهمترین بخش این مبحث به کاربرد این تبدیلات در بیان های مختلف مربوط می شود .این تبدیلات کانوننیک را در حل مسائل مختلفی می توان بکار برد.عمده ترین این مسائل که به عنوان مسائل استاندارد در مکانیک کوانتومی مطرح هستند مثال نوسانگر هماهنگ و ذره آزاد می باشد که ما به بررسی توابع موجی و تحولّ گرهای زمانی آنها می پردازیم.در این بررسی ما از دیدگاههای مختلفی به حل این مسائل خواهیم پرداخت. کلّی ترین و عمومی ترین حالتی هم که در نظر گرفته می شود حالتی است که تبدیلات ما یکانی باشند.در تعدادی از موارد هم کار با تابع مولّد مستقل از زمان

بسیار راحتتر خواهد بود.از جمله کاربردهای دیگر این تبدیلات می توان به کاربرد آنها در بررسی کوانتوم مکانیک لیوویل اشاره کرد.این کاربردها جواب هایی از این مسائل بما می دهند که با مطابقت آنها با جوابهای مد نظر می توان به صحّت و درستی این روش یعنی روش تبدیلات کانونیک پی برد.از طرفی این کاربردها بیانگر این مطلب می باشد که روش تبدیلات کانونیک یک روش کارآمد در حل مسائل است که در برخی از موارد می تواند روشی آسانتر و سهل تر از روش های دیگر باشد.

فصل اول

توابع توزیع در فضای فاز

مقدمه

در تصویر فضای فاز مکانیک کوانتومی یکی از پارامترهای اساسی تابع توزیع فضای فاز می باشد. با داشتن این تابع توزیع می توان کمیت ها و دیگر پارامترهای مهم از جمله احتما لات و مقادیر چشمداشتی و... را بدست اورد.بررسی توابع توزیع و تعریف انها بحث اصلی در این فصل می باشد.مهمترین تابع توز-یع در بین توابع توزیع تابع توزیع ویگنر می باشد.از طرفی این تابع توزیع یک تابع شبه احتمال می باشد زیرا میتواند مقادیر منفی هم اختیار کند.همچنین اصل عدم قطعیت مانع از این می شود که بتوان احتمال را بدرستی در فضای فاز تعریف کرد.انتخاب تابع توزیع در فضای فاز به مسئله مورد نظر بستگی دارد.به عنو-اان مثال در مورد همدوس اپتیکی ما نیازمندیم که مقادیر چشم داشتی از ضرب های مرتبه شده نرمال را داشته باشیم و برای اینکار توابع توزیع Qو(Glauber-sudarshan)P بهترین انتخاب ممکن میباشد[۱]. یا به عنوان مثال دیگردر مسا ئل برخورد تابع توزیع ویگنر انتخاب صحیحی است.تابع توزیع ویگنر دارای مزایای دیگری نیز میباشد که از جمله می توان به سادگی و قابل حل بودن معادلات تحول زمانی حاکم بر ان اشاره کرد.حال به بررسی توابع توزیع و خواص و روابط مابین آنها می پردازیم.

۱-۱ توابع توزیع فضای فاز

۱-۱-۱ تعریف توابع توزیع فضای فاز

یکی از مزیتهای فضای فاز این است که ما بجای عملگر با اعداد مختلط سروکار داریم.حال برای تعریف توابع توزیع از تعریف مقدار چشمداشتی استفاده می کنیم.اگر تابع توزیع $F(q,p)$ را داشته باشیم بوسیله تعریف مقدار چشمداشتی $\hat{A}(\hat{q},\hat{p})$ خواهیم داشت:

$$Tr\{\hat{\rho}(\hat{q},\hat{p},t)\hat{A}(\hat{q},\hat{p})\}=\int dq\int dp A(q,p)F(q,p,t) \qquad (۱-۱)$$

$\hat{\rho}(\hat{q},\hat{p},t)$ عملگر چگالی می باشد.در این حالت $A(q,p)$ فرم عدد مختلط عملگر $\hat{A}(\hat{q},\hat{p})$ است که تنها p,q را بجای $\hat{q},\hat{p}$ قرار داده ایم.در محاسبه برخی مقادیر چشم داشتی مشکلاتی وجود خواهد داشت. به عنوان مثال مقدار چشمداشتی عملگر $e^{i\xi\hat{q}+i\eta\hat{p}}$ را بدست می آوریم.

$$Tr\{\hat{\rho}(\hat{q},\hat{p},t)e^{i\xi\hat{q}+i\eta\hat{p}}\}=\int dq\int dp e^{i\xi q+i\eta p}F(q,p) \qquad (۱-۲)$$

ولی مقدار چشمداشتی عملگر $e^{i\xi\hat{q}}e^{i\eta\hat{p}}$ هم همان مقدار بالایی را می دهد.ولی دو عملگر $\hat{q},\hat{p}$ با یکدیگر جابجایی ندارندوخواهیم داشت:

$$e^{i\xi\hat{q}+i\eta\hat{p}}=e^{i\xi\hat{q}}e^{i\eta\hat{p}}e^{i\hbar\xi\eta/۲} \qquad (۱-۳)$$

از طرفی برای اینکه این دو مقدار چشمداشتی از همدیگر اختلاف داشته باشند می توان از تابعی مانند $f(q,p)$ با متغییر های اسکالراستفاده کرد.این روش منحصر بفرد نیست وزمانیکه فرم f مشخص شد حالت منحصربفردی پیدا می کند.پس تعریف مقدار چشمداشتی عملگر مورد نظر بفرم زیر در می آید:

$$Tr\{\hat{\rho}(\hat{q},\hat{p},t)e^{i\xi\hat{q}+i\eta\hat{p}}f(\xi,\eta)\}=\int dq\int dp e^{i\xi q+i\eta p}F^f(q,p) \qquad (۱-۴)$$

این f از جابجایی عملگر های $\hat{q},\hat{p}$ ایجاد می شود.

$$F^f(q,p,t)=\frac{۱}{۴\pi^۲}\int d\xi\int d\eta Tr\{\hat{\rho}(\hat{q},\hat{p},t)e^{i\xi\hat{q}+i\eta\hat{p}}f(\xi,\eta)\}e^{-i\xi q-i\eta p}$$
$$=\frac{۱}{۴\pi^۲}\int d\xi\int d\eta\int dq'\langle q'+\frac{۱}{۲}\eta\hbar\,|\,\hat{\rho}\,|\,q'-\frac{۱}{۲}\eta\hbar\rangle f(\xi,\eta)e^{i\xi(q'-q)}e^{-i\eta p} \qquad (۱-۵)$$

این تعریف کلی برای توابع توزیع فضای فاز می باشد.حال با داشتن f های مختلف می توان توابع توزیع $F^f(q,p,t)$ مختلفی را بدست آورد.

۲-۱-۱ تابع توزیع ویگنر

اگر $f(\xi,\eta)=۱$ باشد یا به عبارتی $e^{i\xi\hat{q}+i\eta\hat{p}}\rightleftharpoons e^{i\xi q+i\eta p}$ در این حالت

$$F^w(q,p,t)=\frac{۱}{۴\pi^۲}\int d\xi\int d\eta Tr\{\hat{\rho}(\hat{q},\hat{p},t)e^{i\xi\hat{q}+i\eta\hat{p}}\}e^{-i\xi q-i\eta p}$$
$$=\frac{۱}{۴\pi^۲}\int d\xi\int d\eta\int dq'\langle q'+\frac{۱}{۲}\eta\hbar\,|\,\hat{\rho}\,|\,q'-\frac{۱}{۲}\eta\hbar\rangle f(\xi,\eta)e^{i\xi(q'-q)}e^{-i\eta p}$$
$$=\frac{۱}{۲\pi}\int d\eta\langle q+\frac{۱}{۲}\eta\hbar\,|\,\hat{\rho}\,|\,q-\frac{۱}{۲}\eta\hbar\rangle e^{-i\eta p} \qquad (۱-۶)$$

و برای یک حالت خالص $\hat{\rho}=|\Psi\rangle\langle\Psi|$ و $x=\eta\hbar/۲$:

$$F^w(q,p,t)=\frac{۱}{\pi\hbar}\int dx e^{-۲ipx/\hbar}\Psi^*(q-x,t)\Psi(q+x,t) \qquad (۱-۷)$$