





صورتجلسه دفاع از رساله دکتری

شماره: ۲۲۱۸

تاریخ: ۹۰/۶/۱۵

با تأییدات خداوند متعال و با استعانت از حضرت ولی عصر (عج) جلسه دفاع از پایان نامه دکتری

خانم: سمنیرا بهرامی رشته: فیزیک گرایش: -

تحت عنوان: "توابع توزیع کوانتومی و کاربرد آن ها"

در تاریخ ۱۳۹۰/۴/۱۵ با حضور هیأت محترم داوران در دانشگاه زنجان برگزار گردید و نظر هیأت داوران بشرح زیر می باشد:

قبول (با درجه عالی) امتیاز: ۱۸/۶ (.....) دفاع مجدد مردود

- ۱- نفر ۲-۱۸
- ۲- شماره ۱۷۹۹-۱۱۳
- ۳- خوب ۱۴-۱۵۳۹
- ۴- نادر قبول ۱۲-۱۳۹۹

محمد رفیعی

عضو هیأت داوران	نام و نام خانوادگی	مرتبه علمی	امضاء
۱- استاد راهنما	دکتر سعداله نصیری	استاد	
۲- استاد ممتحن خارج از دانشگاه	دکتر محمود بیامی	دانشیار	
۳- استاد ممتحن خارج از دانشگاه	دکتر جعفر محمودی	استادیار	
۴- استاد ممتحن داخل دانشگاه	دکتر امیرحسین درونه	دانشیار	
۵- استاد ممتحن داخل دانشگاه	دکتر محمد محمودی	دانشیار	
۶- نماینده تحصیلات تکمیلی	دکتر محمدابراهیمی	استادیار	

دکتر محمد رفیعی
مدیر تحصیلات تکمیلی دانشگاه زنجان

دکتر محمد رفیعی
معاون آموزشی و تحصیلات تکمیلی
دانشکده علوم



دانشگاه سقز

دانشکده علوم - گروه فیزیک

پایان نامه کارشناسی ارشد

توابع توریع کوانتومی و کاربرد آن ها

نگارنده:

سمیرا بهرامی

استاد راهنما:

دکتر سعدالله نصیری قیداری

تیر ماه ۹۰

چکیده

اساس و پیدایش توابع توزیع کوانتومی بر مبنای تحقیقاتی است که ویگنر در سال ۱۹۳۲ در زمینه سیستم های بس ذره ای انجام داد . او در حین مطالعه این سیستم ها در دم اهای پایین متوجه شد که توابع توزیع موجود قادر به توجیه رفتار ذرات در این دماها نمی باشد به همین جهت با در نظر گرفتن تصحیحات کوانتومی لازم، تابع توزیعی معرفی کرد که مبنای پیدایش روشی جدید برای مطالعه مکانیک آمار کوانتومی و مکانیک کوانتومی گردید. پس از ویگنر افراد دیگری توابع توزیعی چون هوسیمی، کریکوود، مهتا، گلابر و معرفی کردند. تعریف این توابع با توجه به معادل های تابعی عملگرها صورت می گرفت تا اینکه در سال ۱۹۹۳ ثبوتی و نصیری با معرفی فضای فاز گسترش یافته چارچوبی را فراهم آوردند که هر کدام از این توابع توزیع به عنوان نمایشی از این فضا معرفی شوند . علاوه بر این آنها نشان دادند با استفاده از تبدیلات بندادی که در این فضا معرفی می شوند می توان به نمایش های مختلف دست یافت که نه تنها معرف توابع توزیع شناخته شده تا کنون است بلکه توابع توزیع جدیدی را نیز معرفی می نماید. بنابراین با استفاده از ابزار تبدیلات بندادی فضای فاز گسترش یافته می توان به حل مسائل متفاوت در حوزه های مختلف مکانیک کوانتومی پرداخت. در این رساله سعی شده است تا با بهره گیری از این ساختار محاسباتی فضای فاز گسترش یافته به بررسی پتانسیل کوانتومی ، که همواره از موضوع های مورد بحث در مکانیک کوانتومی است، پرداخته شود . با توجه به کارهای قبلی که در این زمینه در فضای فاز گسترش یافته صورت گرفته تلاش شده تا نمایشی پیدا شود که در آن پتانسیل کوانتومی برای هر پتانسیل دلخواه از بین رود . مسئله دیگری که در این رساله مورد بحث قرار گرفته کوانتش انرژی است که با استفاده از حقیقی بودن تابع توزیع ویگنر راه جدیدی برای کوانتش انرژی پیشنهاد شده است . در نهایت با توجه به اهمیت مسائل مرزی در مکانیک کوانتومی حالت خاصی از این مسائل در فضای فاز گسترش یافته مورد بررسی قرار گرفته است و نشان داده شده که حضور مرز در این گونه مسائل را می توان به صورت پتانسیلی که در هامیلتونی ظاهر می شود دید.

فهرست

فصل اول

مقدمه ۹

فصل دوم

مروری بر مکانیک کلاسیک، مکانیک کوانتومی، مکانیک آمار کلاسیک و مکانیک آمار کوانتومی

۱-۲) مکانیک کلاسیک ۱۷

۲-۱-۲) روش لاگرانژ ۱۷

۲-۱-۲) دینامیک هامیلتونی ۱۸

۳-۱-۲) تبدیلات بندادی ۲۰

۴-۱-۲) روش سیمپلکتیک برای بررسی تبدیلات بندادی ۲۴

۵-۱-۲) قلاب پواسون ۲۷

۲-۲) مکانیک کوانتومی ۲۹

۱-۲-۲) تبدیلات یکانی ۳۱

۳-۲) مکانیک آمار کلاسیک ۳۲

۴-۲) مکانیک آمار کوانتومی ۳۵

فصل سوم

توابع توزیع کوانتومی و کاربرد های آن

۱-۳) تعریف توابع توزیع کوانتومی ۳۹

- ۴۲..... (۲-۳) تابع توزیع ویگنر
- ۴۵..... (۳-۳) تابع توزیع نرمال و آنتی نرمال
- ۴۸..... (۴-۳) تابع توزیع هوسیمی
- ۵۰..... (۵-۳) تابع توزیع استاندارد و آنتی استاندارد
- ۵۲..... (۶-۳) توابع توزیع دیگر
- ۵۴..... (۷-۳) جمع بندی
- ۵۵..... (۸-۳) ارتباط توابع توزیع مختلف

فصل چهارم

فضای فاز گسترش یافته

- ۵۶..... (۱-۴) گسترش مکانیک کلاسیک
- ۶۰..... (۱-۱-۴) تبدیلات بندادی گسترش یافته
- ۶۱..... (۲-۱-۴) قلاب پواسون گسترش یافته
- ۶۲..... (۲-۴) مکانیک کوانتومی در فضای فاز گسترش یافته
- ۶۳..... (۱-۲-۴) جواب های معادله (۲۳.۴)
- ۶۹..... (۲-۲-۴) همخوانی کلاسیک
- ۷۰..... (۳-۲-۴) همخوانی کوانتومی
- ۷۱..... (۴-۲-۴) معادله فون نویمان و ماتریس چگالی در فضای فاز گسترش یافته
- ۷۵..... (۳-۴) ارتباط توابع توزیع کوانتومی در فضای فاز گسترش یافته

فصل پنجم

کاربردهای فضای فاز گسترش یافته

- ۱-۵) پتانسیل کوانتومی در فضای فاز گسترش یافته ۸۱
- ۱-۱-۵) تعریف پتانسیل کوانتومی ۸۲
- ۲-۱-۵) پتانسیل کوانتومی در فضای تکانه ۸۵
- ۲-۵) حذف پتانسیل کوانتومی در فضای فاز گسترش یافته ۸۷
- ۱-۲-۵) پتانسیل کوانتومی نوسانگر هماهنگ ساده در نمایش هوسیمی ۹۲
- ۲-۲-۵) پتانسیل کوانتومی هر پتانسیل دلخواه ۹۶
- ۳-۵) کوانتس انرژی با استفاده از حقیقی بودن تابع توزیع ویگنر ۱۰۳
- ۱-۳-۵) کنش گسترش یافته ویگنر ۱۰۴
- ۲-۳-۵) ویژه مقادیر انرژی نوسانگر هماهنگ ساده ۱۰۵
- ۳-۳-۵) ویژه مقادیر انرژی ذره در جعبه ۱۰۶
- ۴-۳-۵) ویژه مقادیر انرژی اتم های هیدروژن گونه ۱۰۷
- ۴-۵) فضای فاز گسترش یافته در حضور مرز ۱۰۸
- ۱-۴-۵) تابع توزیع فضای فاز گسترش یافته در حضور مرز ۱۰۹
- ۲-۴-۵) ارتباط تابع توزیع ویگنر مقید و تابع توزیع گسترش یافته مقید ۱۱۶

فصل ششم

- بحث و نتیجه گیری ۱۲۰
- مراجع ۱۲۲

فصل اول

مقدمه

در جهان پیرامون ما پدیده های بس ذره ای فراوانی دیده می شود مانند مولکول ها در هوا، اتم های یک کریستال، فوتون های درون یک کاواک ، زنبورها در یک کندو، سلول های سیستم عصبی، افراد در گروه های اجتماعی، ستاره های کهکشان و..... این پدیده ها از تنوع و پیچیدگی فراوانی برخوردارند و بررسی آن ها به لحاظ تعداد زیاد ذرات مشکل است. در حوزه علم فیزیک بررسی تحول سیستم های بس ذره ای با استفاده از قوانین موجود در شاخه های مختلف علم فیزیک همچون مکانیک کلاسیک و مکانیک کوانتومی نه تنها پیچیده بلکه عملاً غیر ممکن می نماید. یکی از روش های برطرف نمودن این مشکل به کارگیری مفاهیم آماری همراه با اطلاعات حاصل از مکانیک کلاسیک و مکانیک کوانتومی می باشد. در واقع این ترکیب اساس و بنیان شاخه ای جدید از فیزیک به نام مکانیک آماری^۱ را تشکیل می دهد. به عبارت دیگر می توان گفت که مکانیک آماری پل ارتباطی بین پدیده های میکروسکوپی و ماکروسکوپی را برقرار می کند. پل ارتباطی بین دنیای میکروسکوپی و پدیده های ماکروسکوپی که سر آغازی بر مکانیک آماری بود در سال ۱۸۷۲ توسط بولتزمن^۲ بیان شد. در ابتدای پیدایش مکانیک آماری، سیستم های بس ذره ای با مکانیک آماری کلاسیک مورد بررسی قرار می گرفتند. در مکانیک آماری کلاسیک حالت یک سیستم با مشخص کردن مکان و تکانه هر یک از اجزای تشکیل دهنده آن مشخص می شود. بنابراین سیستمی متشکل از N ذره،

^۱Statistical Mechanics

^۲ Boltzman

دارای 3N مختصه مکان و 3N مختصه تکانه است. اگر با این 6N مختصه یک فضای 6N بعدی تشکیل دهیم در این صورت هر نقطه در این فضا معرف یک حالت سیستم است. به این فضا، فضای فاز گفته می شود تحول دینامیکی سیستم توسط مسیرهایی در این فضا نشان داده می شود. معادلات حاکم بر مسیره های فضای فاز معادلات هامیلتون است. با گذشت سال ها مشخص شد که مکانیک آماری کلاسیک قادر به توجیه بسیاری از پدیده ها نیست در همین راستا پیشرفت مکانیک کوانتومی چارچوب مناسبی را برای مطالعه مکانیک آماری بر پایه مکانیک کوانتومی فراهم آورد. اما حکایت مکانیک آماری کوانتومی حکایتی جدا از مکانیک آماری کلاسیک بود چرا که به دلیل وجود اصل عدم قطعیت هایزنبرگ تعریف فضایی همچون فضای فاز مکانیک کلاسیک در مکانیک کوانتومی غیر ممکن بود. در مکانیک آماری کوانتومی برای توصیف سیستمی با S درجه آزادی باید طبع موج آن سیستم را که تابعی از S مختصه است را مشخص نمود. حالت کوانتومی سیستم به وسیله اعداد خوب کوانتومی مشخص می شوند و تحول دینامیکی سیستم توسط معادلات حرکت در مکانیک کوانتومی بیان می شود. از آنجا که توصیف سیستم های کوانتومی بر مبنای احتمالات است با وارد کردن مفاهیم احتمالات ناشی از فرمول بندی آماری، بر پیچیدگی های مکانیک آماری کوانتومی افزوده شده و بررسی این گونه سیستم ها نیازمند محاسبات طولانی و پیچیده است. برای ارائه توصیفی آماری از سیستم ها بس ذره ای چه در مکانیک کلاسیک و چه در مکانیک کوانتومی به جای آن که توجه خود را بر روی یک سیستم متمرکز کنیم مجموعه ای از سیستم ها که همگی شرایط ماکروسکوپی یکسانی را ارضاء می کنند (آنسامبل¹) در نظر می گیریم. حال می توان پرسید در چه کسری از موارد، سیستم در یکی از حالت های مورد نظر آن است. با دانستن احتمال پیدا کردن سیستم در یکی از حالت های ممکن آن، می توان مقدار متوسط هر یک از پارامترهای سیستم را محاسبه نمود. برای محاسبه این مقادیر متوسط دانستن چگالی احتمال ضروری است. چگالی احتمال در مکانیک آماری کلاسیک تابعی از

¹ Ensemble

مختصات فضای فاز و زمان است و تحول آن توسط معادله لیوویل بیان می شود ولی در مکانیک آماری کوانتومی معادل تابع چگالی کلاسیک، ماتریس چگالی فون - نویمن معرفی می شود. در فرمول بندی کلاسیک مختصات مکان و تکانه هم ارز در نظر گرفته می شوند ولی در مکانیک کوانتومی معمولاً فرمول بندی یا در نمایش مختصات و یا در نمایش تکانه انجام می پذیرد و هم ارزی بین مختصات مکان و تکانه به صورتی که در مکانیک کلاسیک مطرح بود دیگر وجود نخواهد داشت. در جستجوی روشی برای مطالعه مکانیک آماری کوانتومی که بتوان با حفظ تقارن بین مختصات و تکانه های بنیادی^۱ میانگین گیری های شبیه به آنچه در مکانیک آماری کلاسیک وجود داشت به فرمول بندی فضای فاز کوانتومی می رسیم. توابع توزیع کوانتومی به عنوان ابزار اصلی این فرمول بندی نقشی شبیه به تابع چگالی مکانیک آماری کلاسیک بازی می کنند هر چند که این توابع تفاوت های اساسی با تابع چگالی مکانیک آماری کلاسیک دارند. از جمله تفاوت های این توابع، مقادیر منفی است که در مواردی اختیار می کنند از این روست که به این توابع، توابع شبه توزیع گفته می شود. فرمول بندی فضای فاز کوانتومی با معرفی تابع توزیع توسط ویگنر^۲ [۱] در سال ۱۹۳۲ زمانی که مشغول مطالعه رفتار ترمودینامیکی ذرات میکروسکوپی در دماهای پایین بود معرفی شد. ویگنر متوجه شد که در دماهای پایین فرمول بولتزمن که در مکانیک آماری کلاسیک مورد استفاده قرار می گرفت قادر به توجیه رفتار ذرات نمی باشد به همین جهت با وارد کردن تصحیحات کوانتومی در تابع توزیع کلاسیک، تابع توزیع کوانتومی خود را به دست آورد و به این ترتیب روشی را برای مطالعه مکانیک آماری کوانتومی فراهم نمود تا با روشی مشابه مکانیک آماری کلاسیک، سیستم های بس ذره ای کوانتومی مورد بررسی قرار گیرند. یکی از ویژگی های برجسته این روش این است که اصول همخوانی^۳ کمیت های کلاسیکی و کوانتومی به خوبی در آن قابل مشاهده است. تا کنون توابع توزیع مختلفی معرفی شده اند مانند

¹ Canonical Momentum

² Wigner

³ Correspondence Rules

تابع توزیع هوسیمی^۱ [۲]، کریکوود^۲ [۳]، مهتا^۳ [۴]، گلابر^۴ [۵]،..... این توابع دارای ویژگی های متفاوتی می باشند و بنا به ویژگی هایی که دارا می باشند در شاخه های مختلف فیزیک کاربرد دارند مثلاً تابع توزیع ویگنر در مسائل مربوط به نظریه برخورد، تابع توزیع هوسیمی در نظریه آشوب، تابع توزیع گلابر در اپتیک کوانتومی و تابع توزیع کریکوود در مسائل مربوط به مکانیک آماری کاربرد دارند

نکته مهمی که در مورد توابع توزیع باید به آن توجه کرد این است که این توابع بنا به نیاز در شاخه های مختلف مکانیک کوانتومی تعریف شده اند. در سال ۱۹۹۳ ثبوتی و نصیری [۶] با تلفیق مناسبی از فضای مکان و تکانه فرمول بندی جدیدی به نام فضای فاز گسترش یافته^۵ تعریف کردند. آن ها با هم ارز در نظر گرفتن مختصات مکان و تکانه، لاگرانژی و هامیلتونی گسترش یافته را بر پایه لاگرانژی و هامیلتونی در فضای مکان و تکانه معرفی کردند. با تعریف لاگرانژی و هامیلتونی جدید امکان تعریف تکانه های بندادی این دو مختصه نیز فراهم می آید و به این ترتیب فضا گسترده می شود. هم ارزی مختصات مکان و تکانه این امکان را فراهم می آورد تا از تبدیلات بندادی در این فضا بهره بگیریم. پس از معرفی تکانه های بندادی می توان با کوانتش آن ها وارد مکانیک کوانتومی شد. در این مرحله است که تابع توزیع فضای فاز گسترش یافته از معادله ای شبیه به شرودینگر به دست می آید. نکته مهم در مورد فضای فاز گسترش یافته این است که با استفاده از تبدیلات بندادی می توان توابع توزیعی را که تاکنون معرفی شده اند به دست آورد. با وجود این

¹ Husimi

² Kirkwood

³ Mehta

⁴ Glauber

⁵ Extended Phase Space

تبدیلات فضای فاز گسترش یافته ساختار ساده ای در محاسبات ریاضی دارا است و می توان از آن در حل مسائل مختلفی بهره گرفت .

از جمله کاربردهای فضای فاز گسترش یافته ، استفاده از فرمول بندی این فضا برای حل مسائل مختلف در مکانیک کوانتومی می باشد یکی از مسائل مطرح در مکانیک کوانتومی که تاکنون نظرات مختلفی درباره آن ابراز شده است و همواره یکی از مسائل بحث برانگیز مکانیک کوانتومی می باشد مسئله پتانسیل کوانتومی است . پتانسیل کوانتومی از توصیف بوهمی مکانیک کوانتومی ناشی می شود . در تصویر بوهمی مکانیک کوانتومی سعی بر این است که اصول همخوانی مکانیک کوانتومی و مکانیک کلاسیک در سطح معادله هامیلتون – ژاکوبی دیده شود اما تفاوت آنها در جملاتی به نام پتانسیل کوانتومی ظاهر می شود . درباره منشاء ظهور این جملات نظرات مختلفی وجود دارد عده ای معتقدند که این جملات از ذات کوانتومی ذره سرچشمه می گیرند. اگر چنین باشد باید آزمایش هایی که تایید کننده این نظر باشد ارائه شود ولی تاکنون چنین چیزی ارائه نشده است . عده دیگر بر این باورند که پتانسیل کوانتومی جمله ای است که به دلیل انتخاب نادرست نمایش ظاهر شده است همچون جمله نیروی گریز از مرکز که در مختصات کروی ظاهر می شود ولی در مختصات دکارتی وجود ندارد . نصیری با تعمیم مفهوم پتانسیل کوانتومی به فضای فاز گسترش یافته نشان داد که می توان جمله پتانسیل کوانتومی برای نوسانگر هماهنگ ساده ، پتانسیل خطی و ذره آزاد در نمایش ویگنر را از بین برد [۷] . در ادامه این کار نشان خواهیم داد در نمایش هوسیمی نیز با انتخاب پارامتر مناسب که معادل است با نمایش تابع توزیع Q ، می توان جملات پتانسیل کوانتومی نوسانگر هماهنگ ساده را از بین برد [۸]. از بین بردن پتانسیل کوانتومی برای این موارد خاص پتانسیل ، این سوال را در ذهن مطرح می کند که آیا می توان به نمایشی رسید که در آن نمایش جملات پتانسیل کوانتومی برای هر

پتانسیل دلخواه ظاهر نشود؟ در تلاش برای یافتن این نمایش به تابع توزیع ویگنر چلانده^۱ [۹] در حد

پارامترهای چلانده^۲ بسیار بزرگ رسیدیم [۱۰]. اما توانایی فرمول بندی فضای فاز گسترش یافته در حل

مسائل مکانیک کوانتومی به همین جا ختم نمی شود. وجود لاگرانژی گسترش یافته در این فضا امکان

تعریف کنش گسترش یافته را فراهم می آورد و با استفاده از همین ویژگی می توان توابع توزیع از جمله تابع

توزیع ویگنر را به صورت قسمت فازی که همان کنش گسترش یافته است در دامنه حقیقی نوشت و سپس

با اعمال شرط حقیقی بودن تابع توزیع ویگنر به شرطی برای کوانتسشن و در نتیجه انرژی رسید که ما را

قادر می سازد بدون حل هیچ معادله ای ویژه مق داری، ویژه مقادیر انرژی ذره در جعبه، نوسانگر هماهنگ

ساده و اتم هیدروژن را به دست آوریم [۱۱].

سیستم های مقید از جمله مسائل مهم و کلیدی مکانیک کوانتومی می باشد که آنچنان که باید در فضای فاز

کوانتومی به آنها توجه نشده است. در سالهای اخیر دیاز و پراتا^۳ [۱۲] مسئله مسائل مرزی را برای تابع

توزیع ویگنر بررسی کرده اند. آنها برای بدست آوردن تابع توزیع ویگنر در حضور مرز از مسئله ذره در جعبه

بهره گرفته اند و نشان داده اند که وجود مرز در مسئله، جملاتی را به هامیلتونی سیستم اضافه می کند. در

ادامه این تلاش، مسأله ذره در جعبه به عنوان نمونه ای از مسائل مقید و مرزی در فضای فاز گسترش یافته

در نظر گرفته شده و تابع توزیع مربوط، معادله تحول آن و قاعده گسترش برای این سیستم معرفی شده

است و نکته جالبی که دیده می شود این است که همانند کار دیاز و همکارش شرایط مرزی به عنوان جمله

¹ Squeezed Wigner Distribution Function

² Squeezed Parameter

³ Dias and Prata

ای که به هامیلتونی مسئله اضافه می شود ظاهر شده لکن قاعده گسترش به همان شکل که در مورد سیستم های غیر مقید بود حفظ شده است. در ضمن با استفاده از یک تبدیل بنماد می توان ارتباط این تابع توزیع با تابع توزیع ویگنر مقید که آن ها به دست آوردند را نشان داد. با توجه به مطالبی که گفته شد در فصل دوم این رساله مروری خواهیم داشت بر مکانیک آماری کلاسیک و مکانیک آماری کوانتومی سپس در فصل سوم توابع توزیع کوانتومی و کاربردهای آن ها را بررسی خواهیم کرد. در فصل چهارم نحوه پیدایش فضای فاز گسترش یافته را دنبال خواهیم کرد. در فصل پنجم کاربردهایی از فضای فاز گسترش یافته برای حل مسائل مطرح خواهد شد و فصل پایانی نیز به نتیجه گیری و ارائه پیشنهادهای جدید برای ادامه کار در فضای فاز گسترش یافته اختصاص خواهد یافت.

فصل دوم

مروری بر مکانیک آماری کلاسیک و مکانیک آماری کوانتومی

توابع توزیع کوانتومی ابزار اصلی مطالعه فضای فاز کوانتومی است و از آنجا که فضای فاز کوانتومی به عنوان یکی از روش های مطالعه مکانیک آماری کوانتومی شناخته می شود ضروری است که قبل از وارد شدن به مباحث مربوط به توابع توزیع کوانتومی مروری کلی بر مکانیک کلاسیک، مکانیک کوانتومی و همچنین مباحث آماری مربوط داشته باشیم. با توجه به روش های بسیاری که برای مطالعه مکانیک کلاسیک و کوانتومی وجود دارد از روش های مطالعه مکانیک کلاسیک، مختصری در مورد روش لاگرانژ^۱ و هامیلتون^۲ و همچنین روش هامیلتون - ژاکوبی^۳ و از روش های مطالعه مکانیک کوانتومی روش شرودینگر^۴ و روش ماتریس چگالی مطرح خواهد شد. هدف از مطالعه این روش ها تکرار مطالب مکتوب نیست بلکه ایجاد پیش زمینه مناسبی برای مطالعه توابع توزیع کوانتومی و نحوه پیدایش فضای فاز گسترش یافته است.

¹ Lagrange's Dynamics

² Hamilton Dynamics

³ Hamilton-Jacobi Theory

⁴ Schrodinger method

بررسی حرکت اجسام مادی موجب شده تا شاخه ای از علم فیزیک به نام " مکانیک " شکل گیرد در قرن اخیر این شاخه از علم فیزیک را در تقابل با شاخه های جدید همچون مکانیک کوانتومی " مکانیک کلاسیک " نام نهادند. علاوه بر قوانین نیوتون از جمله روش های مطالعه مکانیک کلاسیک، روش لاگرانژ و هامیلتون می باشد. هر چند این روش ها چیزی اضافه بر روش نیوتونی برای بررسی حرکات اجسام ندارد ولی در برخورد با مسائل پیچیده از محاسباتی ساده تر برخوردارند چرا که در این روش با کمیت های اسکالر سر و کار داریم و این در حالی است که در روش نیوتونی بردارها به عنوان ابزار محاسباتی به کار برده می شوند. علاوه بر این، روش لاگرانژ و هامیلتون به عنوان دروازه ورود از مکانیک کلاسیک به مکانیک کوانتومی نیز تلقی می شوند لذا در این سطح به خوبی می توان اصول همخواری این دو شاخه از فیزیک را دید.

۲-۱-۱) روش لاگرانژ

معادلات حاکم بر حرکت اجسام در دینامیک لاگرانژی، معادلات حرکت اویلر - لاگرانژ^۱ [۱۳] می باشند برای به دست آوردن این معادلات از اصل کمترین کنش^۲ بهره می گیریم (صفحه ۳۵۶، ویرایش سوم مکانیک کلاسیک گلدستین را ببینید). تابع لاگرانژی در فضای پیکر بندی^۳ با رابطه زیر بیان شود

$$L^q(q, \dot{q}) = T(\dot{q}) + V(q), \quad (1.2)$$

که در آن $T(\dot{q})$ انرژی جنبشی سیستم و $V(q)$ انرژی پتانسیل سیستم می باشد. کنش نیز با توجه با لاگرانژی در فضای پیکر بندی به صورت زیر تعریف می شود

¹ Euler-Lagrange Equations

² The Principle of Least Action

³ Configuration Space

$$S^q(q, t) = \int_{t_1}^{t_2} L^q(q, \dot{q}) dt. \quad (۲.۲)$$

از آنجایی که سیستم مسیری را طی می کند که کنش سیستم کمینه شود داریم

$$\delta S^q = 0, \quad (۳.۲)$$

که در این صورت معادلات اوایلر - لاگرانژ به صورت زیر به دست می آیند

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L^q}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L^q}{\partial q_i} = 0, \quad i = 1, 2, 3, \dots \quad (۴.۲)$$

این معادلات برای سیستمی که n درجه آزادی دارد شامل n معادله درجه دو می باشد. برای مشخص کردن

حالت دقیق سیستم به $2n$ ثابت اختیاری که شرایط اولیه سیستم را در یک زمان معین مشخص می کنند

نیاز است. عبارت $\frac{\partial L^q}{\partial \dot{q}_i}$ چنانچه روی یک مسیر واقعی محاسبه گردد تکانه مزدوج^۱ مختصه q_i است. لازم به

ذکر است که شاخص q در معادلات بالا نشان دهنده نمایش پیکربندی است.

۲ - ۱ - ۲) دینامیک هامیلتونی

لاگرانژی یک سیستم بر حسب مختصات مکان و سرعت های تعمیم یافته^۲ بیان می شود اما اساس کار در

روش هامیلتونی استفاده از مختصات مکان و تکانه تعمیم یافته متناظر آن است. از نقطه نظر ریاضی رسیدن

از تابع لاگرانژی به تابع هامیلتونی متناظر است با تغییر متغیرها از مجموعه (q, \dot{q}, t) به مجموعه (q, p, t)

با استفاده از تبدیل لژندار^۳، که در آن p تکانه بندادی^۱ مختصه q است. یعنی

^۱ Conjugate Momentum

^۲ Generalized Velocity

^۳ Legendre Transformation

$$H(q, p, t) = \dot{q}_i p_i - L^q(q, \dot{q}, t), \quad (5.2)$$

$H(p, q, t)$ تابع هامیلتونی سیستم است. معادلات هامیلتون نیز به صورت زیر به دست می آیند

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad \text{و} \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad i = 1, 2, 3, \dots \quad (6.2)$$

معادلات (۶.۲)، $2n$ معادله مرتبه اول با $2n$ ثابت اختیاری هستند این ثوابت توسط شرایط اولیه تعیین می شوند. آنچه تا اینجا گفته شد مربوط به توصیف سیستم در فضای پیکر بندی است به همین ترتیب می توان سیستم را در فضای تکانه نیز مطالعه کرد. اگر $L^p(p, \dot{p}, t)$ تابع لاگرانژی در فضای تکانه باشد با به کار بستن تبدیل لژاندر در جهت عکس می توان از تابع هامیلتونی سیستم به لاگرانژی در فضای تکانه رسید به صورت زیر

$$L^p(p, \dot{p}, t) = \dot{p}_i q_i + H(q, p, t), \quad (7.2)$$

اگر از طرفین معادله بالا دیفرانسیل بگیریم و از معادلات هامیلتون (معادلات (۶.۲)) استفاده کنیم خواهیم داشت:

$$dL^p(p, \dot{p}) = q_i d\dot{p}_i + \dot{p}_i dq_i + \frac{\partial H}{\partial q_i} dq_i + \frac{\partial H}{\partial p_i} dp_i = q_i d\dot{p}_i + \dot{q}_i dp_i, \quad (8.2)$$

که در آن

$$q_i = \frac{\partial L^p}{\partial \dot{p}_i}, \quad \dot{q}_i = \frac{\partial L^p}{\partial p_i}. \quad (9.2)$$

¹ Conjugate Momentum

به عنوان مثال نوسانگر هماهنگ ساده یک بعدی، $V(q) = \frac{1}{2}kq^2$ ، را در نظر بگیرید. لاگرانژی آن در فضای

پیکر بندی طبق معادله (۱.۲) به صورت $L^q(q, \dot{q}) = \frac{1}{2}m\dot{q}^2 - \frac{1}{2}kq^2$ و طبق معادله (۵.۲) تابع هامیلتونی

آن نیز به صورت $H(p, q) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kq^2$ است.

پای نوشتن لاگرانژی در فضای تکانه از معادله (۷.۲) بهره می گیریم

$$L^p(p, \dot{p}) = \dot{p}q + \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kq^2, \quad (۱۰.۲)$$

طبق معادلات هامیلتون، $\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} = -kq$ ، است در این صورت خواهیم داشت

$$L^p(p, \dot{p}) = -\frac{\dot{p}^2}{k} + \frac{p^2}{2m} + \frac{\dot{p}^2}{2k} = \frac{p^2}{2m} - \frac{\dot{p}^2}{2k}. \quad (۱۱.۲)$$

این مثال به خوبی نحوه نوشتن لاگرانژی در فضای تکانه را نشان می دهد.

۲-۱-۳) تبدیلات بندادی^۱

با توجه به مباحث قبل ممکن است این سوال پیش آید که تفاوت دینامیک هامیلتونی با دینامیک لاگرانژی

چیست؟ آیا معادلات هامیلتون در مقایسه با معادلات اوپلر - لاگرانژ از محاسبات کمتری برای دست یافتن

به جواب مساله برخوردارند؟ در جواب باید گفت خیر! نه تنها معادلات هامیلتون از محاسبات کمتری

برخوردار نیستند بلکه پیچیدگی های ریاضی استفاده از این معادلات در همان سطح معادلات اوپلر - لاگرانژ

است. پس سوال این است " استفاده از دینامیک هامیلتونی چه مزیتی نسبت به روش های دیگر به ویژه

^۱ Canonical Transformations