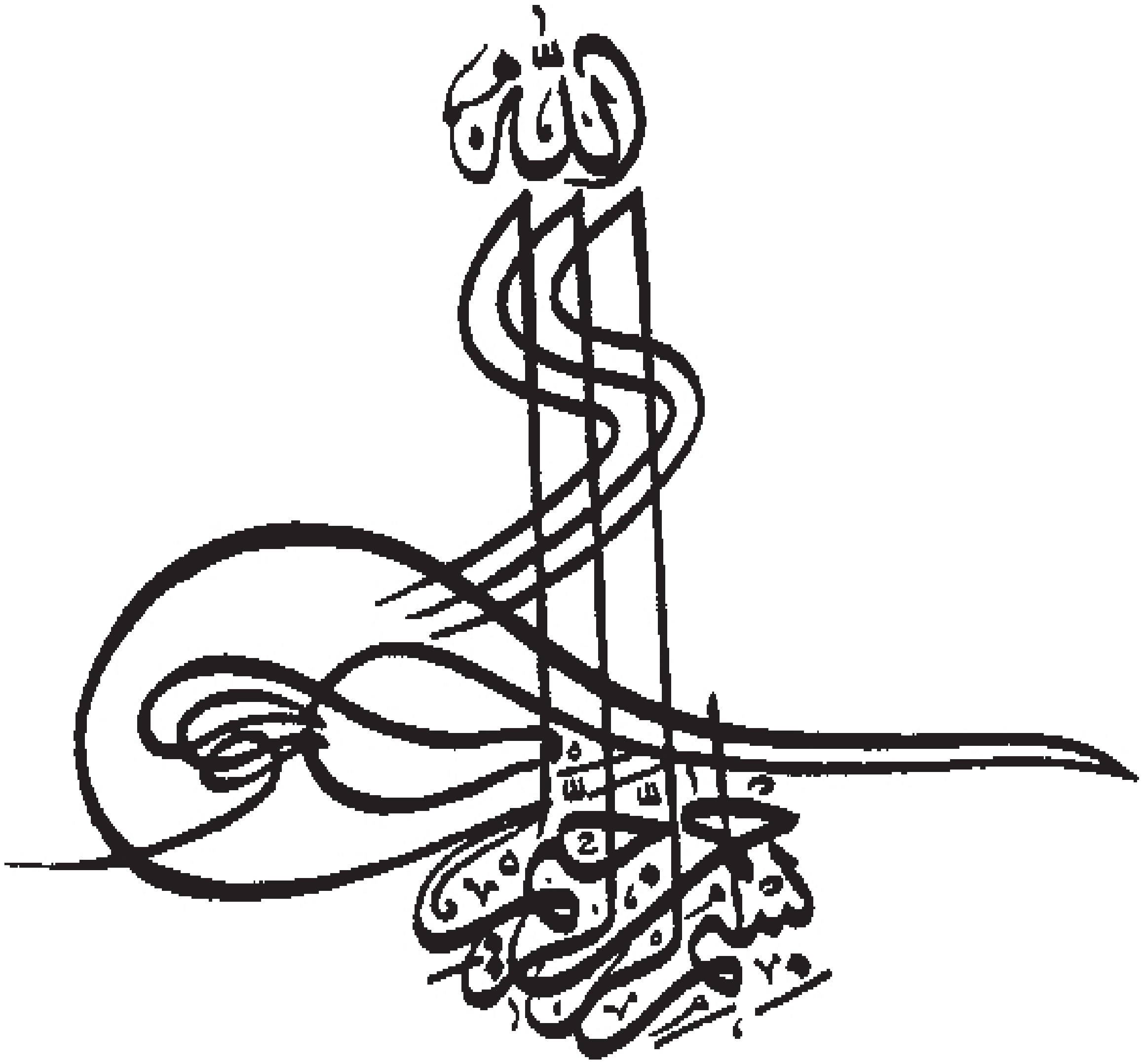


دانشگاه صنعتي اصفهان
دانشکده فيزيک

حل معادله شرودینگر در چندضلعی‌های منتظم با استفاده از نظریه گروه‌ها

پایان نامه کارشناسی ارشد رشته فیزیک

آزاده نعمتی

استاد راهنما:
دکتر احمد شیرزاد

۱۳۹۰

دانشگاه صنعتی اصفهان

دانشکدهٔ فیزیک

پایان نامهٔ کارشناسی ارشد رشتهٔ فیزیک

تحت عنوان

حل معادله شرودینگر در چند ضلعی‌های منتظم با استفاده از نظریه گروه‌ها

توسط

آزاده نعمتی

در تاریخ ۱۳۹۰/۶/۲۱ توسط کمیته تخصصی زیر مورد بررسی و تصویب نهایی قرار گرفت.

۱ –استاد راهنمای پایان نامه	دکتر احمد شیرزاد
۲ –استاد مشاور پایان نامه	دکتر سید اکبر جعفری
۳ –استاد مدعو	دکتر کیوان آقابابایی سامانی
۴ –استاد ممتحن داخلی	دکتر فرهاد شهبازی
سرپرست تحصیلات تکمیلی	دکتر فرهاد شهبازی

تشکر و قدردانی

از:

پدر و مادرم ؛ عزیزترین سرمایه‌های هستی‌ام،

برادرم و همسرش ؛ پشتیبان و تکیه گاه‌های همیشگی‌ام،

استاد راهنمای بزرگوارم ؛ روشنایی ده افکارم، وجد آفرین حیات علمی‌ام،

استاد مشاور ارجمندم؛ با ایده‌های نو و همیشه مورد تحسین‌ام،

تمامی استادان عزیزی که از آن‌ها آموختم، یادشان همواره راهنمایم خواهد بود،

دوستانی که محبت و صمیمیت شان همراه همیشگی‌ام بود،

و تمامی افرادی که در رشد افکارم قدم برداشتند،

از تمامی شما سپاس‌گزارم.

کلیهٔ حقوق مادی مترتب بر نتایج مطالعات،
ابتکارات و نو آوری‌های ناشی از تحقیق موضوع این
پایان‌نامه متعلق به دانشگاه صنعتی اصفهان است.

تقدیم به:

دو فرشته‌ی هستی‌ام،

آرامبخش زندگی‌ام،

دو بزرگواری که تکاپو را از آن‌ها آموختم،

پدر و مادرم

فهرست مندرجات

چکیده

در این پایان نامه، حل معادله شرودینگر در چندضلعی‌های منتظم را بررسی می کنیم. می دانیم که پاسخ معادله شرودینگر در تعداد کمی از چندضلعی‌های منتظم ، جداپذیر است و ویژه توابع در این چاه‌های پتانسیل یک مجموعه‌ی کامل تشکیل می‌دهند. حال می خواهیم این مسئله را بررسی کنیم که آیا در دیگر چاه‌های پتانسیل چندضلعی منتظم نیز می توان پاسخ‌های دقیق معادله شرودینگر با شرط مرزی دیریشله را به‌دست آورد و آیا این پاسخ‌ها لزوما مجموعه‌ی کاملی را تشکیل می‌دهند؟

رهیافتی را که در پیش خواهیم گرفت، استفاده از گروه تقارنی این ساختارهای هندسی و ایجاد تابع موج در نمایش‌های کاهش ناپذیر مربوطه است. با استفاده از این روش، مجموعه‌ی کامل ویژه توابع در چاه مثلث منتظم به دست می‌آید. اما با اعمال آن روی چاه پتانسیل شش ضلعی منتظم می‌بینیم که توابع موجی که در نمایش‌های کاهش ناپذیر گروه تقارنی C_{6v} قرار می‌گیرند در صورتی که شرط مرزی دیریشله را ارضا کنند، در دیگر نواحی چاه نیز صفر خواهند برد.

با دنبال کردن قضیه‌ای ریاضی نشان داده می‌شود که پاسخ معادله شرودینگر به صورت برهم نهی از امواج تخت تنها در چاه‌های پتانسیل مستطیل، مربع، مثلث های منتظم، قائم‌الزاویه 45 درجه و قائم‌الزاویه 60 درجه امکان پذیر است. مجموعه ی پاسخ ها را در دو دسته‌ی حل‌های اولیه و برآمده نام گذاری می کنیم بر این مبنا که آیا حل‌های یک چندضلعی از حل‌های چندضلعی دیگری که آن را فرش می کند به‌دست می‌آید یا خیر. این قضیه را به این صورت تعبیر می کنیم که تنها این دسته از چندضلعی‌ها هستند که حل اولیه دارند و پاسخ‌های آن‌ها مجموعه‌ی کامل می‌سازند. اما به کمک چند قضیه نشان خواهیم داد که چاه شش ضلعی منتظم پاسخ مستقلی از خود با شرط مرزی دیریشله ندارد و تنها پاسخ های آن پاسخ‌های چاه پتانسیل مثلث منتظم با سه شرط مرزی دیریشله است که این‌ها مجموعه‌ی کاملی نمی‌سازند.

همچنین روش‌های تقریبی که برای حل چاه پتانسیل شش ضلعی منتظم به کار رفته است را مورد نقد و بررسی قرار می‌دهیم. ابتدا روش‌های عددی را بحث میکنیم و این مسئله را بررسی می کنیم که آیا در این روش هر دو شرط پاسخ معادله هلمهولتز بودن و ارضای شرط مرزی دیریشله رعایت شده است یا خیر. در ادامه روش دیگری که سعی در به‌دست آوردن ویژه توابع به روش تحلیلی دارد را نیز نقد می کنیم. در این روش با استفاده از بازمقیاس شعاعی پاسخ‌های ذره‌ی محصور در دیسک دایروی، معادله شرودینگر برای ذره‌ی محصور در بیلیارد به شکل دلخواه حل شده است. نشان خواهیم داد که پاسخ‌هایی بدست آمده به این روش با اینکه شرط مرزی را ارضا میکنند اما پاسخ معادله‌ی هلمهولتز نیستند.

مسئله‌ی دیگری که در نظر خواهیم گرفت آرایه‌ای از شش ضلعی‌های منتظم است که معادله شرودینگر با شرط مرزی دوره‌ای را در آن حل خواهیم کرد. در حالت خاص این شرط مرزی می‌تواند شرط مرزی دیریشله یا نویمن باشد. ویژه توابع در 4 نمایش کاهش ناپذیر یک بعدی و 2 نمایش کاهش ناپذیر دو بعدی گروه تقارنی C_{6v} را می‌یابیم و نشان می‌دهیم که پاسخ‌های با شرط مرزی دیریشله، همان پاسخ های بر آمده‌ی مربوط به مثلث منتظم هستند.

کلمات کلیدی: معادله شرودینگر، جند ضلعی منتظم، جاه پتانسیل، گروه تقارنی، نمایش کاهش ناپذیر، شش ضلعی منتظم، شرط مرزی دیریشله، حل اولیه، حل برآمده

فصل ۱

مقدمه

معادله‌ی هلمهولتز با شرایط مرزی مختلف در حوزه‌های گوناگونی از فیزیک اهمیت دارد، از موجبرهای الکترومغناطیسی با مقاطع با اشکال مختلف هندسی گرفته تا نقاط کوانتومی که در آن‌ها الکترون در قفسی محبوس است و سرانجام حل معادله‌ی شرودینگر در چاه‌های پتانسیل دو بعدی با اشکال منتظم.

چاه دو بعدی با ساختار هندسی شش ضلعی منتظم می‌تواند اهمیت ویژه‌ای داشته باشد. در کنار مسائلی همچون نقاط کوانتومی شش ضلعی، موجبرهای الکترومغناطیسی با مقطع شش ضلعی کاربرد این ساختار هندسی در مسئله‌ی گرافین جالب توجه است. در این پایان نامه، مسئله‌ی اصلی که مد نظر قرار می‌گیرد یافتن ویژه حالت‌ها و طیف ذره‌ی محصور در چاه پتانسیل بی‌نهایت شش ضلعی منتظم است. در بررسی این مسئله دیده می‌شود که به موازات آن، حل معادله شرودینگر در دیگر چندضلعی‌های تخت منتظم کوژ (تمامی زوایای داخلی کوچکتر از ۱۸۰ درجه هستند) نیز باید مورد توجه قرار گیرد. روشی که در برخورد با این مسئله در پیش می‌گیریم استفاده از نمایش‌های کاهش‌ناپذیر وابسته به گروه تقارنی ساختار هندسی است و سعی می‌کنیم ویژه توابع مسئله را در هر نمایش کاهش ناپذیر بیابیم. زیبایی این رهیافت در این است که ویژه توابع بر اساس تقارنی که در بر دارند دسته بندی می‌شوند، تبهگنی‌ها به وضوح خود را نشان می‌دهند و مهمتر از همه این‌که می‌توان با استفاده از این روش متوجه شد که آیا مجموعه‌ی کاملی از ویژه توابع برای مسئله‌ی مورد نظر به‌دست آمده است یا خیر.

ابتدا به بیان پیشینه‌ی این مسئله می‌پردازیم.
واضح است که ابتدا مشابه کلاسیکی این مسئله ذهن افراد را درگیر کرد. سؤالی که ابتدا در مورد قفس‌های دو بعدی مطرح شد این بود که هنگامی‌که یک ذره در صفحه‌ای با دیواره‌های سخت (بیلیارد) را بررسی می‌کنیم مسیرهای ممکن برای این ذره در فضای فاز چه رفتاری دارد و آیا این مسیرها در هر زمانی قابل پیش بینی خواهند بود؟
نتیجه این است که چگونگی رفتار ذره توسط شکل هندسی بیلیارد تعیین می‌شود. بر این اساس، بیلیاردها به سه دسته‌ی بیلیاردهای حل‌پذیر، شبه حل‌پذیر و آشوبناک تقسیم بندی می‌شوند. در این میان تنها بیلیاردهای کلاسیکی حل‌پذیر، مربع، مستطیل، مثلث متساوی‌الاضلاع، مثلث‌های قائم‌الزاویه ۶۰ درجه و ۴۵ درجه، دایره و بیضی هستند. چند ضلعی‌های محدب با زوایای رأس $\pi n/m$ که n و m دو عدد صحیح اول نسبت به یکدیگر هستند، جزو بیلیاردهای شبه حل‌پذیر محسوب می‌شوند و در غیر این صورت بیلیارد کلاسیکی آشوبناک است. در این خصوص بحث خوبی را می‌توان در مرجع [۱] دنبال کرد و به طور خاص در مورد بیلیاردهای شبه حل پذیر، مرجع [۲] این مسئله را بررسی کرده است.

اما در مورد بیلیاردهای کوانتومی چندضلعی با چاه‌های پتانسیل نامتناهی با مسئله‌ی حل معادله‌ی شرودینگر روبرو هستیم. در مورد اشکال هندسی مستطیل و مربع معادله‌ی شرودینگر جداپذیر است و به سادگی طیف کامل ذره‌ی محصور در آن‌ها قابل محاسبه هستند. اما ساده‌ترین شکل هندسی که معادله شرودینگر برای آن قابل جداسازی نمی‌باشد، مثلث متساوی‌الاضلاع است. این مسأله در مقالات زیادی مورد بررسی قرار گرفته است. از مهم‌ترین آن‌ها مراجع [۱۰—۳] هستند. در این میان دو روش مربوط به مراجع [۸] و [۱۰] در فصل ۲ مورد توجه قرار گرفته اند. اولین روش استفاده از نمایش‌های کاهش ناپذیر گروه تقارنی مثلث متساوی‌الاضلاع است که به ما این اطمینان را می‌بخشد که مجموعه‌ی کامل پاسخ‌های این مسئله را یافته‌ایم. در روش دوم با گروه تقارنی که خودسان (ایزومورف) با گروه تقارنی مثلث منتظم است کار می‌کنیم و نشان می‌دهیم که این دو روش معادل هستند.

اما آیا با افزایش تعداد اضلاع در چندضلعی‌ها همچنان معادله شرودینگر را می‌توان با شرط مرزی دیریشله به صورت دقیق حل کرد؟ این مسئله در مرجع [۹] بررسی شده است و با استفاده از دو لم ریاضی نشان داده شده که بیلیاردهای کوانتومی حل‌پذیر دقیقاً همان اشکال هندسی هستند که برای بیلیاردهای کلاسیکی حل‌پذیر می‌باشند. در اینجا منظور از چندضلعی‌های حل پذیر کوانتومی آن چندضلعی‌هایی هستند که پاسخ معادله شرودینگر در آن‌ها را می‌توان به صورت برهم نهی تعداد متناهی از امواج تخت نوشت. این مسأله با روشی متفاوت در مرجع [۱۱] نیز بررسی شده است و نتیجه‌ی یکسانی با آنچه در مرجع [۹] بیان شده به‌دست آمد.

بعدها این سؤال مطرح شد که آیا اکنون که طیف کامل بیلیاردهای حل‌پذیر توسط برهم نهی امواج تخت قابل دستیابی است می‌توان مجموعه‌ی کامل‌تری از توابع تحلیلی را یافت که بتوان با استفاده از آن‌ها طیف کاملی برای رده‌ی بزرگتری از بیلیاردها بیابیم؟ در مرجع [۱۲] نشان داده شد که پاسخ منفی است و چنین چیزی امکان ندارد.

در این میان شکل هندسی شش ضلعی منتظم جایگاه خاصی دارد. این شکل هندسی جزو بیلیاردهای کلاسیک شبه حل پذیر می‌باشد که رفتاری میان رفتار بیلیاردهای حل پذیر و آشوبناک نشان می‌دهد. خواهیم دید که از نظر کوانتومی نیز نکات جالبی در حل معادله‌ی شرودینگر در چاه پتانسیل بی نهایت شش ضلعی منتظم وجود دارد.

گفتیم که در مرجع [۹] ثابت شده است بیلیاردهای چندضلعی حل‌پذیر عبارتند از مثلث متساوی‌الاضلاع، مثلث‌های قائم الزاویه ۶۰ درجه و ۴۵ درجه، مستطیل و مربع. تمامی این چندضلعی‌ها یک ویژگی مشترک دارند این‌که با تمامی این‌ها می‌توان یک صفحه را فرش کرد. تنها چندضلعی دیگری که این ویژگی را دارد، شش ضلعی منتظم است. بنابراین به نظر می‌رسد که برای ذره‌ی محبوس در چاه شش ضلعی نیز بتوان طیف کاملی با استفاده از برهم نهی امواج تخت به‌دست آورد. در فصل ۳ با استفاده از نمایش‌های کاهش ناپذیر گروه تقارنی شش ضلعی نشان می‌دهیم که چنین امری امکان ندارد. در مرجع [۱۴] نیز سعی شده است که به روشی متفاوت چنین پاسخی به‌دست آید. در این مرجع نیز پاسخ منفی است اما آنچه به صورت برداشت کلی بیان می‌شود کاملاً اشتباه است. در فصل ۳ این موضوع را به طور کامل بررسی می‌کنیم و اشکالات آن تصحیح می‌شود.

در فصل ۳ نشان می‌دهیم که مجموعه‌ی پاسخ‌های کامل در یک چاه پتانسیل شش ضلعی با شرط مرزی دیریشله تنها پاسخ‌های چاه پتانسیل متساوی‌الاضلاع با سه شرط مرزی دیریشله است. از اینجا اثبات می‌شود که ذره در چاه بی‌نهایت شش ضلعی طیف کامل ندارد از جمله اینکه حالت پایه به صورت متعارف که حالتی بدون گره تعریف می‌شود، امکان‌پذیر نیست. نکته‌ی مهمی که آن را استدلال می‌کنیم این است که این حالت پایه در کل وجود ندارد و نه این‌که به روش دیگر برای دستیابی نیاز باشد. بنابراین ویژه‌حالت‌های چاه بی نهایت شش ضلعی، پایه کامل نمی‌سازند. همچنین مسئله‌ی آرایه‌ای از شش ضلعی منتظم با شرط مرزی دوره‌ای را بررسی می‌کنیم و تابع موج در تمامی نمایش‌های کاهش ناپذیر را به‌دست می آوریم. به این ترتیب تمامی ویژه توابع با شرط مرزی دوره‌ای را خواهیم داشت. در حالت خاص این شرط مرزی دوره‌ای می‌تواند شرط مرزی دیریشله یا نویمن باشد. پاسخ‌هایی که برای این شرایط مرزی به‌دست می آیند، پاسخ‌های چاه مثلث منتظم با همین شرایط مرزی هستند.

در فصل ۴، روش‌های عددی که در مرجع [۱۵] برای حل معادله‌ی هلمهولتز در چاه پتانسیل شش ضلعی به کار رفته است را مطالعه می‌کنیم همچنین روش تحلیلی در مرجع [۱۶] را بررسی می‌کنیم که

سعی دارد با استفاده از بازمقیاس پاسخ‌های بیلیارد دایروی، پاسخ‌های بیلیارد تخت با شکل دلخواه که شش ضلعی را نیز در بر دارد به‌دست آورد. اما نشان می‌دهیم که در هر دو این روش‌ها مسئله‌ی مورد نظر ما حل نشده است. چون یکی از دو شرط پاسخ معادله‌ی هلمهولتز بودن و یا شرط مرزی دیریشله ارضا نمی‌شود. پایه‌ی کار در چنین مراجعی این است که تصور می‌شود بخشی از طیف، تحلیلی است به این معنا که از برهم نهی امواج تخت حاصل می‌شود و بخشی دیگر باید از روش‌های عددی به دست آید. اما در فصل ۳ نشان داده‌ایم که بخشی از طیف کلاً وجود ندارد و با وجود ادعایی که صورت می‌گیرد، آنچه در این مراجع به‌دست می‌آید پاسخ‌های چاه بی نهایت شش ضلعی نیستند.

فصل ۲

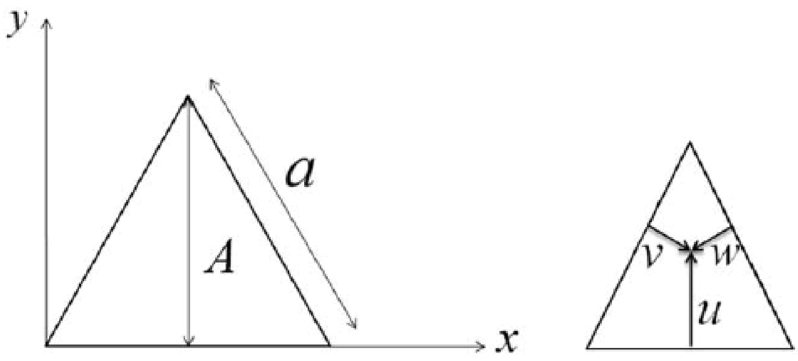
حل معادله‌ی شرودینگر برای ذره‌ی محصور در چاه پتانسیل مثلث منتظم

۲–۱ مقدمه

مسئله‌ی حل معادله‌ی شرودینگر برای ذره‌ی محصور در مثلث متساوی‌الاضلاع به روش‌های متفاوتی بررسی شده است. همانطور که واضح است این مسئله به روش جداسازی متغیرها قابل حل نیست. متیو[۱] و همکارش پیشنهاد دادند که با استفاده از بازتاب‌ها و چرخش‌های متوالی مثلث، شبکه ای متناوب ایجاد شود و جوابی به صورت سری فوریه دوگانه بدست آوردند[۳]. در این رهیافت، مثلث اصلی را از روی اضلاعش بازتاب می‌دهند به گونه‌ای که تمام صفحه توسط این مثلث پوشانده شود. بنابراین پاسخ معادله‌ی لاپلاس در ناحیه‌ی اولیه‌ی مثلث متساوی‌الاضلاع به پاسخ این معادله در تمامی صفحه بسط می‌یابد. سپس تابع موج به صورت سری فوریه دوگانه‌ای بسط داده می‌شود. با اعمال شرایط تقارنی و تناوب شبکه روی آن، محدودیت هایی روی دو عدد کوانتومی مربوطه بدست می‌آید. کریشنامورتی[۲] و همکارانش ارتباطی میان حل مسئله‌ی سه فرمیون در یک چاه یک بعدی و ذره‌ی محصور درون مثلث یافتند[٦]. در این روش با معرفی متغیرهای جدیدی که بر حسب مکان ذرات تعریف می شوند، حرکت مرکز جرم سامانه‌ی سه ذره‌ای از دینامیک داخلی جدا می شود. روابط

---

۱ Mathews
۲ Krishnamurthy



شکل ۲–۱: سمت راست: متغیرهای کمکی u، v و w ; سمت چپ: دستگاه مختصات برای یک مثلث متساوی‌الاضلاع

متغیرهای جدید با یکدیگر به گونه ای است که شرایط مرزی یک مثلث متساوی‌الاضلاع را تعریف می‌کنند. به این ترتیب، مسئله‌ی یک بعدی با سه ذره‌ی مشابه به مسئله‌ی دو بعدی با یک ذره تبدیل می‌شود.

روشی که در اینجا معرفی می‌شود استفاده از نمایشهای کاهش‌ناپذیر گروه تقارنی ساختار هندسی مثلث متساوی‌الاضلاع است [۸]. با استفاده از این روش می توان در مورد کامل بودن مجموعه‌ی جوابها اطمینان داشت. همچنین ویژه توابع تبهگن به صورتی واضح دسته‌بندی می‌شوند.

۲–۲ روش حل

مثلث متساوی‌الاضلاع به ضلع a و ارتفاع A را در نظر می گیریم (سمت چپ شکل ۲–۱) که پتانسیل درون آن صفر و روی دیواره‌ها بی‌نهایت است. بنابراین معادله‌ی شرودینگر درون مثلث به صورت زیر است:

$$-\left(\frac{\hbar^{۲}}{۲m}\right)\left[\frac{\partial^{۲}}{\partial x^{۲}}+\frac{\partial^{۲}}{\partial y^{۲}}\right]\Psi\left(x,y\right)=E\Psi\left(x,y\right) \qquad (۱–۲)$$

که حل آن با شرط مرزی صفر شدن تابع موج روی سه ضلع مثلث، مورد نظر است.

متغیرهای کمکی u، v و w را بر حسب مختصه‌های دکارتی x و y به عنوان فاصله‌های نقطه‌ی درون مثلث از سه ضلع آن در نظر می‌گیریم (سمت راست شکل ۲–۱).

$$u=\left(\frac{۲\pi}{A}\right)y,\quad v=\left(\frac{۲\pi}{A}\right)\left(-y/۲+\sqrt{۳}x/۲\right),\quad w=\left(\frac{۲\pi}{A}\right)\left(-y/۲-\sqrt{۳}x/۲\right)+۲\pi \qquad (۲–۲)$$

متغیرهای یاد شده مستقل از هم نیستند و رابطه‌ی $u+v+w=2\pi$ میان آنها وجود دارد. این رابطه باعث می‌شود که تعداد متغیرهای مستقل به ۲ کاهش یابد. با معرفی این سه متغیر، شرایط مرزی به صورت زیر هستند:

$$\Psi\left(u=0, v=2\pi-w\right)=\Psi\left(v=0, w=2\pi-u\right)=\Psi\left(w=0, u=2\pi-v\right)=0 \quad (2-3)$$

مثلث متساوی‌الاضلاع تحت گروه نقطه‌ای C_{3v} ناوردا است. عناصر این گروه تقارنی عبارتند از سه چرخش $\frac{2\pi}{3}, \frac{4\pi}{3}, 2\pi$ حول مرکز مثلث و بازتاب نسبت به نیمسازهای مثلث. جدول مشخصه‌ی این گروه تقارنی در جدول (۲—۱) آمده است. کلاس عناصر چرخش را با نماد N_kC_k نشان می‌دهیم که N_k نشان دهنده‌ی تعداد اعضای کلاس است و k نشان دهنده‌ی چرخش $2\pi/k$ می‌باشد. منظور از نماد σ بازتاب نسبت به یک صفحه است. σ_v نشان بازتاب نسبت به صفحه‌ی عمودی است.
این گروه تقارنی با گروه S_3 یعنی گروه جایگشت سه عنصر، ایزومورف است. بنابراین با نسبت دادن جایگشت رئوس مثلث به جایگشت متغیرهای u، v و w می‌توان عناصر گروه تقارنی C_{3v} را به این صورت نوشت:

$$E: u \leftrightarrow u, v \leftrightarrow v, w \leftrightarrow w \;\;,\;\; C_3: u \leftarrow v \leftarrow w \leftarrow u \;\;,\;\; C_3^2: u \rightarrow v \rightarrow w \rightarrow u$$
$$\sigma_1: u \leftrightarrow v \;\;,\;\; \sigma_2: w \leftrightarrow u \;\;,\;\; \sigma_3: v \leftrightarrow w \quad (2-4)$$

جدول ۲—۱: جدول مشخصه‌ی گروه تقارنی C_{3v}

C_{3v}	E	$3\sigma_v$	$2C_3$
A_1	1	1	1
A_2	1	-1	1
E	2	0	-1

با توجه به رابطه‌ی بالا با در نظر گرفتن اثر عناصر تقارنی روی بردار ستونی شده (u, v, w) ، نمایش کاهش‌پذیر 3×3 زیر برای گروه تقارنی S_3 یا C_{3v} بدست می‌آید:

$$E=\begin{pmatrix} ۱ & ۰ & ۰ \\ ۰ & ۱ & ۰ \\ ۰ & ۰ & ۱ \end{pmatrix},\ C_{۳}=\begin{pmatrix} ۰ & ۱ & ۰ \\ ۰ & ۰ & ۱ \\ ۱ & ۰ & ۰ \end{pmatrix},\ C_{۳}^{۲}=\begin{pmatrix} ۰ & ۰ & ۱ \\ ۱ & ۰ & ۰ \\ ۰ & ۱ & ۰ \end{pmatrix}$$
$$\sigma_{۱}=\begin{pmatrix} ۰ & ۱ & ۰ \\ ۱ & ۰ & ۰ \\ ۰ & ۰ & ۱ \end{pmatrix},\ \sigma_{۲}=\begin{pmatrix} ۰ & ۰ & ۱ \\ ۰ & ۱ & ۰ \\ ۱ & ۰ & ۰ \end{pmatrix},\ \sigma_{۳}=\begin{pmatrix} ۱ & ۰ & ۰ \\ ۰ & ۰ & ۱ \\ ۰ & ۱ & ۰ \end{pmatrix} \quad (۵-۲)$$

معادله‌ی شرودینگر برای ذره‌ی آزاد طبق رابطه‌ی (۲–۱) پاسخ‌هایی به شکل $f\left(c_{۱}x+c_{۲}y\right)$ دارد که f تابع مثلثاتی کسینوس، سینوس یا ترکیب موهومی این دو است. با استفاده از رابطه‌ی (۲–۲) این تابع را می‌توان به صورت $f\left(pu-qv\right)$ بیان کرد. q و p دو عدد کوانتومی مربوط به گیر اندازی ذره در این چاه دو بعدی هستند.

نکته‌ی اساسی این است که پاسخ معادله‌ی شرودینگر باید تقارن $C_{۳v}$ داشته باشد. طبق جدول (۲–۱) این گروه دو نمایش یک بعدی و یک نمایش دو بعدی کاهش‌ناپذیر دارد. بنابراین عملگر تصویر مربوط به هر نمایش را می‌سازیم و با اعمال آن روی "تابع پایه‌ی"[۳] $f\left(pu-qv\right)$ تابع موج با تقارن لازم را به‌دست می‌آوریم.

در پیوست ۱ در مورد عملگر تصویر و کاربرد آن توضیح داده شده است. این عملگر از رابطه‌ی زیر به‌دست می‌آید[۱۳]:

$$P_{\mu i}^{j}=\left(\frac{n_{\mu}}{n_{G}}\right)\sum_{g}D_{\mu}^{-۱}\left(g\right)_{i}^{j}U\left(g\right) \quad (۶-۲)$$

در این رابطه، $U\left(g\right)$ نمایشی از گروه G است که در اینجا نمایش کاهش‌پذیر ۳ × ۳ مطابق رابطه‌ی (۲–۵) است. D_{μ} نمایش ماتریسی کاهش‌ناپذیر μ از گروه است. n_{μ} بعد نمایش و n_{G} تعداد اعضای گروه است.

در اینجا اهمیت معرفی متغیرهای کمکی u, v و w مشخص می‌شود. در صورتی که با متغیرهای x و y کار می‌کردیم عناصر گروه تقارنی برحسب جایگشت رأس‌های مثلث نوشته می‌شدند. بنابراین نیاز به بدست آوردن تغییرات x و y در اثر هر عمل تقارنی داشتیم که مسلماً با اثر دادن عملگر تصویر روی تابع $f\left(px+qy\right)$ روابط ساده‌ای به‌دست نمی‌آمدند.

۲–۲–۱ نمایش $A_{۱}$

این نمایش، نمایش همانی است که به تمام اعضای گروه عدد ۱ را نسبت می‌دهد. با توجه به اینکه این نمایش یک بعدی است، $D_{\mu}^{-۱}\left(g\right)_{i}^{j}$ همان مشخصه‌ی نسبت داده شده به وارون هر عنصر است. با

[۳] basis function

صرفنظر کردن از ضریب کلی $\frac{n_p}{n_G}$ ، عملگر تصویر مطابق رابطه‌ی زیر بدست می آید:

$$P(A_1) = E + C_3 + C_3^2 + \sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 \qquad (۳–۷)$$

با توجه به رابطه‌ی (۲–۴) با اعمال این عملگر روی تابع پایه خواهیم داشت:

$$\Psi_{p,q}^{A_1}(x,y) = f(pu-qv)+f(pv-qw)+f(pw-qu)+f(pv-qu)+f(pw-qv)+f(pu-qw) \qquad (۳–۸)$$

با اعمال شرایط مرزی (رابطه‌ی(۲–۳)) می‌بینیم که تنها در صورتی که f تابع سینوس و q و p عدد صحیح باشند، این شرایط ارضا می‌شوند. با استفاده از این نکته و جای‌گذاری آن در رابطه‌ی (۲–۸) به نتایج زیر می‌رسیم:

$$\Psi_{q,p} = -\Psi_{p,q}, \quad \Psi_{-p,-q} = -\Psi_{p,q}, \quad \Psi_{p+q,-p} = -\Psi_{p,q} \qquad (۳–۹)$$

مشخص است که با جابجا کردن دو عدد کوانتومی یا تغییر علامت آنها به تابع موج جدیدی نمی‌رسیم. بنابراین اعداد کوانتومی q و p را به $p > q \geq 0$ محدود می‌کنیم. به این وسیله توابع موج تکراری را حذف کرده‌ایم.

با جای‌گزین کردن تابع f با تابع سینوس و استفاده از رابطه‌ی جمع سینوس‌ها، تابع موج به صورت زیر بدست می آید:

$$\Psi_{p,q}^{A_1}(x,y) = \cos\left[q\sqrt{3}\pi x/A\right] sin\left[(2p+q)\pi y/A\right] - cos\left[p\sqrt{3}\pi x/A\right] sin\left[(2q+p)\pi y/A\right]$$
$$-cos\left[(p+q)\sqrt{3}\pi x/A\right]\sin\left[(p-q)\pi y/A\right] \qquad q = 0, 1, 2, ..., \quad p = q+1, q+2, ... \qquad (۳–۱۰)$$

و با جای‌گذاری رابطه‌ی بالا در معادله‌ی شرودینگر ویژه مقادیر انرژی به صورت زیر خواهند بود:

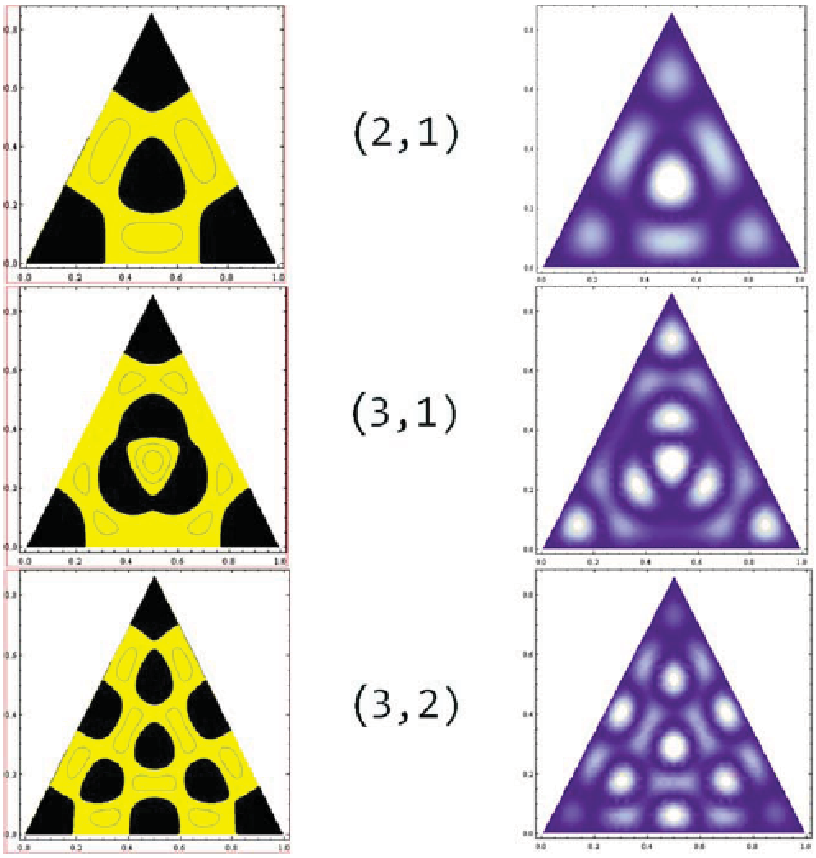
$$E_{p,q} = \left(p^2 + pq + q^2\right) E_0, \quad E_0 \equiv h^2 / 2mA^2 = E_{1,0} \qquad (۳–۱۱)$$

در شکل (۲–۲)، سه ویژه حالت با پایین‌ترین انرژی برای $q \neq 0$ رسم شده است. در سمت راست، چگالی احتمال ذره و در سمت چپ، علامت تابع موج رسم شده است. نواحی با چگالی احتمال بیشتر روشن‌تر نشان داده شده اند. در سمت چپ، در نواحی تیره تابع موج علامت مثبت دارد و در نواحی روشن علامت تابع منفی است.

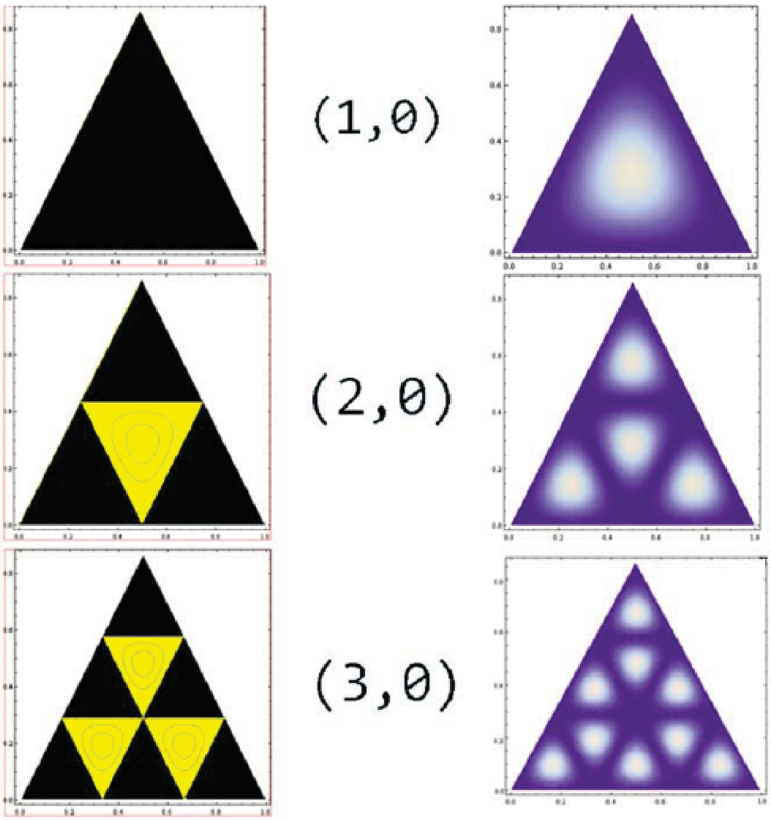
همانطور که انتظار می‌رود این شکل‌های تقارنی تحت چرخش‌های ۱۲۰ و ۲۴۰ درجه حول مرکز مثلث و بازتاب نسبت به سه ارتفاع مثلث ناوردا هستند.

در صورتی‌که $q = 0$ باشد تابع موج در رابطه‌ی(۲–۱۰) به صورت زیر می‌شود:

$$\Psi_{p,0}(A_1) = \sin(2p\pi y/A) - 2\sin(p\pi y/A)\cos\left(p\sqrt{3}\pi x/A\right), \quad p = 1, 2, 3, ... \qquad (۳–۱۲)$$



شکل ۲−۲: تعدادی از پایینترین ویژه حالت‌های انرژی در نمایش کاهش ناپذیر یک بعدی A_1 به ازای $q \neq 0$; سمت راست: چگالی احتمال و سمت چپ: علامت تابع موج



شکل ۲–۳: تعدادی از پایین‌ترین ویژه حالت‌های انرژی در نمایش کاهش ناپذیر یک بعدی A_1 به ازای $q = 0$; سمت راست: چگالی احتمال و سمت چپ: علامت تابع موج

سه ویژه حالت در پایین‌ترین انرژی با $q = 0$ در شکل (۲–۳) رسم شده است. حالت زمینه‌ی انرژی مربوط به مد $(1, 0)$ است. همان‌طور که انتظار می‌رود در این حالت گره وجود ندارد و احتمال یافتن ذره در مرکز مثلث، بیشینه است. با بالا رفتن انرژی، احتمال رفتن ذره به نواحی دیگر مثلث افزایش می‌یابد.

۲–۲–۲ نمایش A_2

با توجه به رابطه‌ی (۲–۶) و جدول (۲–۱)، عملگر تصویر در این نمایش مطابق زیر است:

$$P(A_2) = E + C_3 + C_3^2 - \sigma_1 - \sigma_2 - \sigma_3 \qquad (۱۳–۲)$$

با اعمال این عملگر روی تابع پایه‌ی $f(pu - qv)$ ، تابع موج زیر به‌دست می آید:

$$\Psi_{p,q}^{A_2}(x, y) = f(pu - qv) + f(pv - qw) + f(pw - qu) - f(pv - qu) - f(pw - qv) - f(pu - qw) \qquad (۱۴–۲)$$