مجلهٔ فیزیک، ۱۳۶۱، ۱، ۳۶–۴۷

موج تخت و بسته موج در مسایل مکانیک کوانتومی مقدماتی

برنارد دیو

آزمایشگاه فیزیک نظری و انرژی بالا، دانشگاه پاریس ۷*

چکیده: در بسیاری از درسهای مکانیک کوانتومی، موج تخت و بسته موج در همان آغاز معرفی می‌شوند و برای حل مسایل یک بعدی «ساده» با پتانسیل مربعی، به کار می‌روند. هدف این مقاله توضیح و نقد معنای گزاره‌های متداولی است از این قبیل که «یک جملهٔ e^{ikx} ذره‌ای را نشان می‌دهد که در جهت مثبت x حرکت می‌کند»، و/یا «e^{ikx} باریکهٔ ذرات فرودی را نشان می‌دهد». ابتدا مفاهیم و نتایج لازم باختصار مرور شده‌اند. سپس به منظور ارائه و بحث در مشکلاتی که در یک وضعیت مشخص پیش می‌آیند، یک مسئلهٔ ساده (پراکندگی توسط پلهٔ پتانسیل مربعی) بتفصیل مطالعه شده است. در پایان نکات کلی‌تر مربوط به این مبحث آمده‌اند.

۱ مقدمه

معمولاً در درسهای مقدماتی مکانیک کوانتومی، پتانسیلهای «مربعی» یک بعدی، اولین مثالها از اثرهای تیپیک کوانتومی را تشکیل می‌دهند: کوانتیدن انرژی در یک چاه پتانسیل، اثر تونل، و غیره. متأسفانه در چنین مسایل «ساده»ای نیز اشکالاتی وجود دارند که مطالعهٔ آنها را بغرنج می‌کنند.

اولین مشکل، خود پتانسیل مربعی است، چرا که، اگر بخواهیم دقیق باشیم، ناپیوستگیهای آن غیرفیزیکی‌اند. ولی این ناپیوستگیها به معنی تغییرات (پیوستهٔ) سریع در شکل ظاهری پتانسیل هستند که در فواصل کوتاهتر از طول موج دوبروی ذرهٔ مورد نظر رخ می‌دهند، و این اساس حل مشکلی است که معمولاً دانشجو بدون زحمت زیادآن را برطرف می‌کند.

ما در اینجا توجه خود را به مشکل بنیادیتری در رابطه با تعبیرفیزیکی موج تخت معطوف می‌کنیم، که اغلب ازآن صرفنظرمی‌شود یا احکام قاطعی ازاین قبیل درمورد آن بیان می‌شود که «در ناحیهٔ سمت راست هیچ جملهٔ e^{-ikx} وجود ندارد، زیرا ذره (ها) از $\infty-$ می‌آید (می‌آیند)، در نتیجه‌دراین ناحیه فقط می‌تواند(می‌توانند) از چپ به راست منتشر شود (شوند)»، یا «احتمال عبور به صورت مجذور قدر مطلق نسبت جملات e^{ikx} در دو ناحیهٔ انتهایی تعریف می‌شود» (واین بخصوص هنگامی ناخوشایندتر می‌شود که در صورت متفاوت بودن عدد موجها، آن را در نسبت آن دو ضرب کنند، و برای توجیه آن ازجریان احتمال کمک بگیرند). هدف مقالهٔ حاضر، کوشش برای روشن کردن معنای اساسی چنین گزاره‌هایی است، که البته در اساس صحیح، ولی از لحاظ آموزشی مخاطره‌آمیزند.

ابتدا در بخش ۲ نمادگذاری مشخص می‌شود و برخی مفاهیم و نتایج اساسی که برای بحث بعدی ضروری‌اند یادآوری می‌شوند. سپس (در بخش ۳) یک مسئلهٔ سادهٔ مشخص، یعنی ذره‌ای که به وسیلهٔ یک پلهٔ پتانسیل مربعی یک بعدی پراکنده می‌شود، مطالعه خواهد شد. بررسی کامل مکانیک ـ کوانتومی این مسئله امکان می‌دهد معنی و مفاد اساسی بحثهای ساده‌تری نظیر آنچه در بالا بدانها اشاره شد، بهتر ارزیابی شود. اگر چه نتایج بخش ۳ برای مورد خاصی به دست می‌آیند، (همچنانکه در بخش ۴ نشان داده می‌شود) می‌توان آنها را به سایر مسایل پتانسیل مربعی یک بعدی و حتی به وضعیتهای پراکندگی واقعی‌تر نیز تعمیم داد.

۲ مرور کوتاهی بر نتایج سودمند

۲.۱. مفاهیم و فرمولهای اساسی

جهت سهولت، به بررسی دستگاههایی اکتفا می‌کنیم که از یک ذرهٔ بدون اسپین به جرم m تشکیل شده‌اند که در یک پتانسیل نرده‌ای (نرداری) $V(\mathbf{r})$ قرار دارد، و این دستگاهها را درچارچوب «مکانیک موجی» (یا نمایش $\mathbf{r}$ مکانیک کوانتومی) توصیف می‌کنیم. در این صورت حالت ذره در لحظهٔ t با یک تابع موج $\psi(\mathbf{r}, t)$ با تعبیراحتمالاتی معروف، مشخص می‌شود. تغییرات زمانی $\psi(\mathbf{r}, t)$ را معادلهٔ معمولی شرودینگر تعیین می‌کند، و خواص فیزیکی دستگاه را می‌توان بر اساس اصول مکانیک کوانتومی، که فرض می‌شود خواننده با آنها آشناست، از تابع موج به دست آورد.

۲.۱.۱. محتوای فیزیکی موج تخت و بسته موج.

معمول شده است که عبارتی به صورت

$$u_k(\mathbf{r}) = \exp(i\,\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) \qquad (۱)$$

را یک «موج تخت» بنامند، که ما آن را تابعی از متغیر مکان $\mathbf{r}$ که با یک شاخص (پیوسته) $\mathbf{k}$ مشخص می‌شود، در نظر می‌گیریم.

اگر بخواهیم دقیق باشیم، هیچ حالت فیزیکی ذره نیست که به $u_k(\mathbf{r})$ وابسته باشد، زیرا بهنجار کردن چگالی احتمال مربوط به آن غیر ممکن است. از این‌رو، موج تخت به فضای تابع موجهای ممکن تعلق ندارد. با این همه، نظریهٔ تبدیل فوریه نشان می‌دهد که هر تابع موج حقیقی $\psi(\mathbf{r})$ را می‌توان روی مجموعهٔ امواج تخت بسط داد:

$$\psi(\mathbf{r}) = \int d^3k\, f(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}). \qquad (۲)$$

این گونه برهم نهش امواج تخت، یک بسته موج نامیده می‌شود.

موج تخت $u_k(\mathbf{r})$ ویژه تابعی از عملگر اندازه حرکت (تکانه) $i\hbar\nabla$ — است با ویژه مقدار

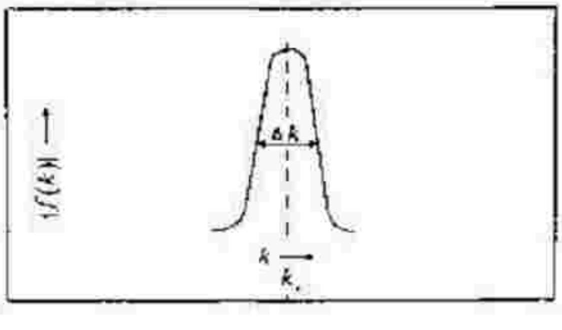
$$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}. \qquad (۳)$$

پس اگر $u_k(\mathbf{r})$ یک تابع موج حقیقی باشد، باید حالتی را با اندازه حرکت (تکانهٔ) معین بیان کند. پتانسیل $V(\mathbf{r})$ که بر ذره اثر می‌کند هر چه باشد، این تعبیر فیزیکی از موج تخت معتبر است. ولی یک مورد خاص هست که در آن موج تخت تعبیر فیزیکی جالب دیگری دارد: اگر ذره آزاد باشد [$V(\mathbf{r}) = ۰$]، $u_k(\mathbf{r})$ یک «تابع موج» مانا خواهد بود (مشروط به اینکه اصطلاح «تابع موج» را بپذیریم)، که حالتی با انرژی معین را بیان می‌کند:

$$E(\mathbf{k}) = \hbar^2\mathbf{k}^2/2m. \qquad \text{(ذرهٔ آزاد)} \qquad (۴)$$

تعبیر فیزیکی بسته موج از تعبیر موج تخت تبعیت می‌کند. در حالت کلی، که تابع پتانسیل غیر صفر است، تجزیهٔ بسته موجی (۲) مربوط به تابع موج $\psi(\mathbf{r})$ توزیع احتمال اندازه حرکت (تکانه) را به دست می‌دهد. از این گذشته، برای یک ذرهٔ آزاد، دانستن بسته موج، که حالت آن را در یک لحظهٔ مفروض بیان می‌کند، برای محاسبهٔ تابع موج در هر لحظهٔ دیگر کافی است: اگر مثلاً $\psi(\mathbf{r})$ تابع موج در لحظهٔ $t = ۰$ باشد، فرمول (۲) بلافاصله نتیجه می‌دهد

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \int d^3k f(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) \times \exp[-iE(\mathbf{k})t/\hbar]. \qquad \text{(ذرهٔ آزاد)} \qquad (۵)$$



شکل ۱. قدر مطلق «تابع ضریب» برای یک بسته موج ساده

۲.۱.۲. شرط فازمانا. دراینجا بسته موجهایی را بررسی می‌کنیم که تابع «ضریبها» ی $f(\mathbf{k})$ ی آنها بسیار ساده است.

برای آنکه مسئله مشخصتر باشد، جهت سهولت، یک مسئلهٔ یک بعدی، یعنی تابع موجی را (در یک لحظهٔ معین) در نظر می‌گیریم که فقط به یک متغیر مکان بستگی دارد: $\psi(x)$. بسته موج را به صورت

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dk\, f(k) \exp(ikx) \qquad (۶)$$

می‌نویسیم. با جدا کردن قدر مطلق و فاز تابع ضریب $f(k)$،

$$f(k) = |f(k)| \exp[i\alpha(k)] \qquad (۷)$$

فرض می‌کنیم که: (الف) قدر مطلق $f(k)$ شکل ساده‌ای دارد، نظیر آنچه‌در شکل ۱ نشان داده شده است ـ به ازای $k = k_0 > ۰$ بیشینه است و تنها در بازه‌ای به پهنای Δk حول k_0، مقادیر محسوسی را اختیار می‌کند. (ب) فاز $\alpha(k)$ تابع کند ـ تغییری از k دربازهٔ Δk است.

برای چنین بسته موج ساده‌ای، تابع موج $\psi(x)$ در فضای مکان نیز ساده است: قدر مطلق آن، $|\psi(x)|$، به ازای مقدار خاص x_0 از متغیر مکان، بیشینه است و تنها در بازه‌ای به پهنای Δx حول x_0 مقادیر محسوسی دارد. می‌دانیم که

$$\Delta x\, \Delta k \geqslant ۱ \qquad (۸)$$

همچنین می‌توان نشان داد که پهنای Δx درفضای مکان، بستگی به زمان (پاشیدگی بسته موج) دارد. ولی ما به مرتبهٔ بزرگی (۸) برای Δx اکتفا می‌کنیم* و توجه

* در اکثر وضعیتهای عملی می‌توان نشان داد که پاشیدگی بسته موج قابل چشم پوشی است (گلدبرگر و واتسون ۱۹۶۴[۲]، ص ۶۳).

شود را به x_0، محل بیشینه یا مرکز بسته موج معطوف می‌کنیم.

با استفاده از تجزیهٔ (۷) می‌توان رابطهٔ (۶) را به صورت زیر نوشت:

$$\psi(x)=\int_{-\infty}^{\infty}dk\,|f(k)|\exp[i\eta(k,x)] \qquad (\text{۹ الف})$$

که در آن

$$\eta(k,x)=kx+\alpha(k). \qquad (\text{۹ ب})$$

در نتیجه، $\psi(x)$ به صورت برهم‌نهشی از امواج مختلف (با شاخص k) که دامنهٔ آنها $|f(k)|$ و فازآنها $\eta(k,x)$ است، درمی‌آید. در این صورت، $|\psi(x)|$، بزرگی چنین برهم‌نهشی به وسیلهٔ تداخل بین امواج تشکیل دهندهٔ آن تعیین می‌شود. با درک این نکته، می‌توان بآسانی فهمید که بیشینهٔ $|\psi(x)|$ وقتی حاصل می‌شود که امواجی که بزرگترین دامنه‌ها را دارند، یعنی امواج مربوط به k های نزدیک به k_0، تداخل سازنده بکنند. و این هنگامی است که $\eta(k,x)$، فازهای این امواج، عملاً در اطراف $k=k_0$ ثابت بمانند. برای تعیین بیشینهٔ بسته موج، کافی است مشتق فاز $\eta(k,x)$ را نسبت به k، به ازای $k=k_0$ مساوی صفر قرار دهیم:

$$\left[\frac{\partial}{\partial k}\eta(k,x)\right]_{k=k_0}=0 \qquad (۱۰)$$

که این، شرط فازمانا است. در مسئله‌ای که ما باآن سر وکار داریم، چنانچه شرط فوق را درمورد رابطهٔ (۹ ب) به‌کار ببریم، نتیجه می‌شود

$$x_0=-\alpha'(k_0) \qquad (۱۱)$$

که درآن $\alpha'(k)$ مشتق $\alpha(k)$ است.

۲.۲. تغییرات زمانی امواج آزاد.

اکنون بحث را به مورد خاص ذرهٔ آزاد محدود می‌کنیم، یعنی موردی که بسته موج بستگی تابع موج را به زمان به دست می‌دهد، همچنانکه در بخش ۱.۱.۲ نشان داده شد.

۱.۲.۲. موج تخت: موج سیار یا ساکن؟ تغییرات زمانی تک موج تخت با ضرب آن در عامل $\exp(iEt/\hbar)$ مربوطه به دست می‌آید:

$$u_k(x,t)=\exp[i(kx-\omega(k)t)] \qquad (\text{۱۲ الف})$$

که درآن

$$\omega(k)=\hbar k^2/2m. \qquad (\text{۱۲ ب})$$

به محض مواجهه شدن با رابطه‌ای مثل (۱۲ الف) می‌توان تشخیص داد که نمایش دهندهٔ یک موج سیار است که با سرعت

$$v(k)=\omega(k)/k \qquad (۱۳)$$

در جهت x های مثبت منتشر می‌شود. در واقع، این گزاره که «یک جملهٔ e^{ikx} ذره‌ای را نشان می‌دهد که در جهت xهای مثبت حرکت می‌کند»، اغلب به همین نحو توجیه می‌شود.

ولی چنین توجیهی نادرست است (حتی اگرگزارهٔ مذکور بتواند معنای درستی بدهد، چنانکه درزیر خواهیم دید) زیرا اولاً سرعت (فازی) (۱۳) تنها نصف سرعت ذره، $\hbar k/m$، است. دیگر اینکه، $u_k(x,t)$ یک «حالت» مانا را مشخص می‌کند، و به هر حال باید یک موج ساکن باشد.

ماهیت مختلط تابع موجهای مکانیک کوانتومی است که امکان می‌دهد یک تابع واحد را بدلخواه نمایشگر یک موج سیار در نظر بگیریم یا یک موج ساکن. درنظریهٔ کلاسیک موج، رابطهٔ (۱۲ الف) عملاً $\cos[kx-\omega(k)t]$ را نشان می‌دهد ومشخصاً بایدبه یک موج سیار وابسته شود، ولی در مکانیک کوانتومی، اساساً اشتباه است که به $u_k(x,t)$ به عنوان یک موج سیار نگاه شود.

۲.۲.۲. انتشار یک بسته موج آزاد. فرض کنیم حالت ذره در لحظهٔ $t=0$ با تابع موج $\psi(x)$ به صورت (۶) بیان شود. اگر ذره آزاد باشد، تابع موج مربوط به آن در یک زمان بعدی t، $\psi(x,t)$، از رابطهٔ زیر به دست می‌آید (بخش ۱.۱.۲):

$$\psi(x,t)=\int_{-\infty}^{\infty}dk\,f(k)\exp[i(kx-\omega(k)t)]. \qquad (۱۴)$$

شرط فازمانا (بخش ۲.۱.۲) بآسانی x_0، محل بیشینهٔ بسته موج (۱۴)، را به دست می‌دهد:

$$x_0=-\alpha'(k_0)+\omega'(k_0)t. \qquad (۱۵)$$

به این ترتیب، محتملترین مکان ذره با زمان تغییر می‌کند، و در جهت xهای مثبت پیش می‌رود. این بار، سرعت (گروهی) متناظر،

$$v_g(k_0)=\omega'(k_0) \qquad (۱۶)$$

با سرعت ذره‌ای که اندازه حرکت(تکانهٔ)آن $p_0=\hbar k_0$ است، یکی می‌شود، زیرا فرمول (۱۲ ب) متضمن این است که

$$v_g(k_0)=\hbar k_0/m. \qquad (۱۷)$$

از این گذشته، فرض کنید با همان تابع ضریب $f(k)$ (که مرکز آن در $k_0 > 0$ است)، در تمام موجهای تشکیل دهندهٔ بسته، k را به $-k$ تبدیل کنیم. در این صورت $\omega(k)$ بدون تغییر می‌ماند، به طوری که بسته موج جدید را می‌توان به شکل زیر نوشت:

$$\psi^{(-)}(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} dk f(k) \exp[i(-kx - \omega(k)t)]. \quad (۱۸)$$

اکنون پشتهٔ این بسته در

$$x_0^{(-)} = \alpha'(k_0) - v_g(k_0)t \qquad (۱۹)$$

واقع است و با سرعت (۱۷) در جهت x های منفی حرکت می‌کند.

به همین دلیل است که گزاره‌ای که در بخش ۱.۲.۲ نقل شد، اساساً درست است: «یک موج تخت آزاد e^{+ikx} (e^{-ikx}) (با $k > 0$) را می‌توان موجی در نظر گرفت که در جهت xهای مثبت (منفی) منتشر می‌شود، زیرا یک بسته موج باریک که با چنین امواجی ساخته می‌شود، همین گونه رفتار می‌کند». سرعتی که باید به چنین انتشاری نسبت داد، سرعت متناظر با تعبیر موج تخت به عنوان موج سیار نیست، بلکه سرعت گروهی (۱۶) است.

۳.۲.۲. «تعبیر ناکامل» موج تخت. ناگفته پیداست که کار کردن با بسته موج نسبتاً دشوار است. همچنانکه در بخش ۳ در یک مثال خاص خواهیم دید، این امکان هست که با محاسبات ساده‌تری درمورد امواج تخت منفرد، همان نتایج صحیح را به دست آوریم. این محاسبات ساده شده، بر پایهٔ «تعبیر» دیگری از موج تخت قراردارند که در اینجا آن را «ناکامل» می‌نامیم تا تأکید شود که چنین تعبیری بنا به مبانی اساسی درست نیست، ولی چنانکه خواهیم دید بسیار عملی است.

(الف) جریان و چگالی احتمال. چگالی احتمال (مکان) وابسته به یک تابع موج (بهنجار شده به واحد) $\psi(\mathbf{r},t)$ عبارت است از

$$\rho(\mathbf{r},t) = |\psi(\mathbf{r},t)|^2. \qquad (۲۰)$$

همچنین می‌دانیم که احتمال، به طور موضعی، پایسته است، یعنی یک جریان احتمال $\mathbf{j}(\mathbf{r},t)$ وجود دارد، به طوری که

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\mathbf{r},t) + \operatorname{div}\mathbf{j}(\mathbf{r},t) = 0 \qquad (۲۱)$$

هرگاه ذره تنها در معرض یک پتانسیل نرده‌ای قرار داشته باشد، جریان احتمال به‌صورت زیر درمی‌آید:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r},t) = -\frac{i\hbar}{2m} \times [\psi^*(\mathbf{r},t)\nabla\psi(\mathbf{r},t) - \psi(\mathbf{r},t)\nabla\psi^*(\mathbf{r},t)]. \quad (۲۲)$$

با به کار بردن فرمولهای (۲۰) و (۲۲) در مورد یک تابع موج مانا، معلوم می‌شود که چگالی و جریان مستقل از زمان هستند. بدیهی است که این امر در مورد موج تخت‌آزاد نیز درست است: اگر فرض شود

$$\psi_k(\mathbf{r},t) = A\exp[i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega(\mathbf{k})t)] \quad (۲۳)$$

که درآن A یک ثابت مختلط است، بآسانی به دست می‌آید

$$\rho_k(\mathbf{r},t) = |A|^2, \ \mathbf{j}_k(\mathbf{r},t) = \frac{\hbar\mathbf{k}}{m}|A|^2 \quad (۲۴)$$

که مستقل از t هستند (و همچنین مستقل از $\mathbf{r}$، ولی این یک به سرشت غیر فیزیکی موج تخت مربوط می‌شود. رک بخش ۱.۱.۲).

(ب) «شارهٔ احتمال» و جریان آن. نتایجی که در (الف) یادآوری شد، تصویری از یک «شارهٔ احتمال» به چگالی $\rho(\mathbf{r},t)$ و چگالی جریان $\mathbf{j}(\mathbf{r},t)$ را به یاد می‌آورد. بدیهی است که این شاره کاملاً پنداری است، و در وهلهٔ اول نقش آن صرفاً این است که با الهام از هیدرودینامیک، زبان شهودی‌تری مورد استفاده قرار گیرد.

درمورد خاص تابع موج مانا نظیر موج تخت آزاد، «شارهٔ احتمال» متناظر، ساکن نیست، چرا که جریان ضرورتاً صفر نیست. ازاین‌رو، ناوابستگی زمانی خواص فیزیکی دریک حالت مانا مانندهٔ ناوابستگی زمانی یک جریان ثابت دائمی درالکتریسته یا هیدرودینامیک است، «شارهٔ احتمال» وابسته به یک تابع موج مانا در یک حالت جریان پایا است.

اکنون برای «عینیت بخشیدن» به احتمالها، باید تعداد زیادی رویداد، در اینجا یعنی تعداد زیادی ذره، را در نظر گرفت: باید یک آزمایش را N بار انجام داد، به‌طوری که هر بار ذرات آن به یک طریق تدارک شده باشند. روشن است که انجام یک تک آزمایش روی یک باریکه یا مجموعه‌ای از N ذره بسیار سریعتر است تا ارسال یا مطالعهٔ یک به یک آنها. چنانچه N ذره در یک زمان مورد بررسی قرار گیرند، «شارهٔ احتمال» تعبیر مشخصتری خواهد داشت: $N\rho(\mathbf{r},t)$ عبارت است از تعداد ذرات در واحد حجم، حول نقطهٔ $\mathbf{r}$ و در لحظهٔ t، و

$N\mathbf{j}(\mathbf{r},t)$ عبارت است از شار ذرات (تعداد ذراتی که در واحد زمان از واحد سطح می‌گذرند). البته باید توجه داشت کــه $\psi(\mathbf{r},t)$ یک تک ذره را بیان مــی‌کند و نه دستگاهی از N ذره را؛ برای آنکه تعبیر فوق معنا داشته باشد، لازم است کــه N ذره کــاملاً از یکدیگر مستقل باشند.

در مورد مـــوج تختی نظیر (۲۳)، ایـــن دیدگاه، تصویرزیر را به دست می‌دهد [فرمول (۲۴) را ببیند]: تمام فضا از ذراتی با چگالی یکنواخت و مستقل از زمان پر شده است؛ چون

$$\mathbf{j}_k = \frac{\hbar \mathbf{k}}{m}\rho_k \qquad (۲۵)$$

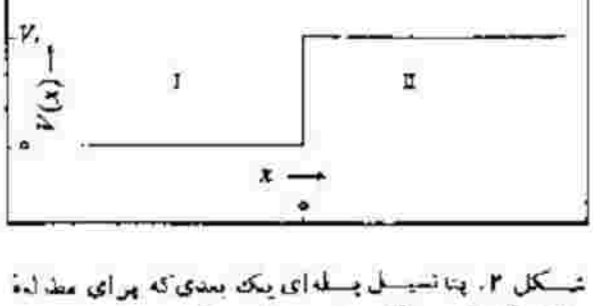
این ذرات بـــا سرعت درست $\hbar\mathbf{k}/m$ درجهت $\mathbf{k}$ حرکت می‌کنند. خلاصه آنکه موج تخت به صورت باریکه‌ای پایا از ذرات مجسم می‌شود. چنین تعبیری «ناکامل» است زیرا یک دستگاه چند ذره‌ای را به یک تابع موج تک ذره‌ای (که حتی یک تابع موج اصیل هم نیست) مربوط می‌کند.

۳ بحث دربارهٔ یک مسئلهٔ سادهٔ پراکندگی

اکنون باید از بررسی موج تخت آزاد محض فراتر برویم وآنها را درمسایل پتانسیل مربعی یک بعدی به کار ببریم. ما یک مسئلهٔ تیپیک ازاین گونه را به عنوان مثال ملموس انتخاب می‌کنیم (کوهن ـ تانوجی و دیگران ۱۹۷۷[۱]، ص ۷۹).

۱.۳. توصیف مدل

می‌خواهیم رفتار یک ذرهٔ (بـــدون اسپین) بـــه جـــرم m را مطالعه کنیم کـــه حرکت آن به یک بعد (محور xها) محدود است و تحت پتانسیل $V(x)$ که در شکل ۲ نشان داده شده است قرار دارد: $V(x)$ بـــه ازای x های منفی (ناحیهٔ I) صفر، و به ازای xهای مثبت (ناحیهٔ II) برابر یک ثابت مثبت V_0 است. همچنانکه در بخش ۱ اشاره شد، این پتانسیل عملاً ایده‌آل شدهٔ انرژی پتانسیلی است با



شـــکل ۲. پتانسیـــل پـــله‌ای یک بعدی که برای مطالعهٔ پراکندگی ذره دریک وضعیت ساده به کار می‌رود.

تغییر سریع ولی پیوسته.

درآغاز ($t = -\infty$) ذره در $x = -\infty$ قرار دارد و دارای سرعتی درجهت xهای مثبت است. می‌خواهیم رفتار مکانیک ـ کوانتومی این ذره را توصیف کنیم، و ببینیم هنگامی‌که ذره به پلهٔ پتانسیل برمی‌خورد چه پدیده‌ای رخ می‌دهد و احتمالهای مربوطه را محاسبه کنیم. پس، این یک مسئلهٔ بسیار سادهٔ پراکندگی است.

۲.۳. حل مسئلهٔ پراکندگی

چـــون پتانسیل $V(x)$ مستقل از زمـــان است، مـــی‌تـــوان مستقیماً کلی‌ترین تابع موجی کـــه معادلـــهٔ شرودینگر را برآورده می‌کند به دست آورد، به شرطی که ویژه حالتهای هامیلتونی

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \qquad (۲۶)$$

و ویـــژه مقدارهـــای مـــربـــوطهٔ آنها معلوم باشند. سپس می‌توان تابع موج مورد نظررا از بین این توابع ممکن برگزید.

۱.۲.۳. ویژه حالتهای هامیلتونی کل. معادلهٔ ویژه مقدار زیر را

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right)\varphi(x) = E\varphi(x) \qquad (۲۷)$$

همراه بـــا این شرط مکمل درنظر می‌گیریم کـــه $\varphi(x)$ و مشتق اول آن بـــه ازای تمام مقادیر x و بخصوص در $x = 0$، پیوسته هستند (واضح است که ضرورت اعمال این شرایط صرفاً نـــاشی از ناپیوستگی (غیر فیزیکی) پتانسیل است).

بسادگی می‌توان نشان داد که معادلهٔ (۲۷) به ازای $E < 0$ هیچ پاسخ غیر بدیهی را نمی‌پذیرد. برعکس، هر مقدار مثبت E قابل قبول خواهد بود. البته باید میان $E < V_0$ و $E > V_0$ تمایز قـــایل شد. در اینجا نتایج محاسبات (مستقیم) مربوطه (بـــرای مثال، رک کوهن ـ تانوجی و دیگران ۱۹۷۷، ص ۶۷) را با به کار بردن نمادگذاری زیر، می‌آوریم:

$$K_0 = \left(\frac{2mV_0}{\hbar^2}\right)^{1/2} \qquad (۲۸ \text{ الف})$$

$$k = \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2} \qquad (۲۸ \text{ ب})$$

(الف) مـــورد انـــرژی پایینتر ($E < V_0$). ویـــژه تابع وابـــسته بـــه یک مقدار انرژی کمتر از V_0، ($k < K_0$) (صرف‌نظر از یک ضریب که از لحاظ فیزیکی بی‌اهمیت

است) یگانه است؛ بنابراین چنین انرژیی ناواگن است. با تعریف $\alpha(k)$ به‌صورت

$$\tan\alpha(k) = (K_0^2 - k^2)^{1/2}/k \tag{۲۹}$$

می‌توان ویژه تابع متناظر، $\varphi_k(x)$، برای هامیلتونی کل (۲۶) را به‌صورت فشردهٔ زیر نوشت:

$$\varphi_k(x) = \theta(-x)(e^{ikx} + e^{-2i\alpha(k)}e^{-ikx}) + \theta(x)2e^{-i\alpha(k)}\cos\alpha(k) \times \exp[-x(K_0^2 - k^2)^{1/2}]. \tag{۳۰}$$

$\theta(x)$ تابع هبویساید است:

$$\theta(x) = \begin{cases} 0 & x<0 \text{ به ازای } \\ 1 & x>0 \text{ به ازای } \end{cases} \tag{۳۱}$$

(ب) مورد انرژی بالاتر ($E>V_0$). هر انرژی E بزرگتر از V_0، ($k>K_0$)، بـه طور دوگانه واگن است. در بـالای (چند گونای) دو بعدی متناظر، می‌توان بدلخواه دو ویژه‌تابع مستقل را انتخاب کـرد. انتخاب زیر، از لحاظ فیزیکی عملی‌ترین انتخاب است:

$$\varphi_k^{(1)}(x) = \theta(-x)(e^{ikx} + A_1(k)e^{-ikx}) + \theta(x)B_1(k) \times \exp[ix(k^2 - K_0^2)^{1/2}] \tag{۳۲ الف}$$

$$\varphi_k^{(2)}(x) = \theta(-x)A_2(k)e^{-ikx} + \theta(x) \times \{B_2(k)\exp[ix(k^2 - K_0^2)^{1/2}] + \exp[-ix(k^2 - K_0^2)^{1/2}]\} \tag{۳۲ ب}$$

که در آن

$$A_1(k) = \frac{k - (k^2 - K_0^2)^{1/2}}{k + (k^2 - K_0^2)^{1/2}} \tag{۳۳ الف}$$

$$B_1(k) = 2k/[k + (k^2 - K_0^2)^{1/2}] \tag{۳۳ ب}$$

و

$$A_2(k) = \frac{2(k^2 - K_0^2)^{1/2}}{(k^2 - K_0^2)^{1/2} + k} \tag{۳۴ الف}$$

$$B_2(k) = \frac{(k^2 - K_0^2)^{1/2} - k}{(k^2 - K_0^2)^{1/2} + k} \tag{۳۴ ب}$$

۳-۲-۲. بسته موجهایی کـه فـرایند پـراکندگـی را توصیف می‌کنند. اکنون می‌توان نتایج بخش ۳-۲-۱ را برای حل مسئلهٔ پراکندگی کـه در بخش ۳-۱ مطرح شد به‌کار گرفت.

از آنجا کـه ویژه مقدارهای E ی هامیلتونی یک طیف پیوسته را تشکیل مـی‌دهند، انـرژی ذرهٔ فرودی را نمی‌توان بدقت تعریف‌کرد؛ باید اجازه داد که انرژیهای ممکن در یک پهنای غیر صفر توزیع شوند. اگر بخواهیم این مطلب را برحسب متغیر k بیان کنیم، که معادل آن است، می‌پذیریم که مشخصهٔ توزیع یک تابع ضریب $f(k)$ به صورتی است کـه در شکل ۱ آمده است؛ فرض حقیقی بودن $f(k)$ (یعنی $\alpha(k) = 0$)، بـدون آنکه از کلیت بحثهای بعدی بکاهد، آنها را ساده‌تر می‌کند.

جهت مشخص‌تر کردن، فرض می‌کنیم که محتملترین مقدار عدد موج k، یعنی k_0، به اندازهٔ کافی با K_0 (که توسط معادلهٔ (۲۸ الف) تعریف شده است) فرق دارد، به طوری که مقادیری از k که به ازای آنها $f(k) \neq 0$ است یا تماماً کوچکتر از K_0اند و یا تماماً بزرگتر از آن. این فرض از لحاظ فیزیکـی معقول است: «انرژی» ذرهٔ فرودی یـا از V_0 کمتر است یـا بیشتر؛ در اینجا ما به وضعیتهایی که توزیع انرژی در آنها گسترشی فراتر از خط مرزی V_0 دارند نمی‌پـردازیم (هر چندآنها را نیز می‌توان بر اساس فرمولهای فوق بررسی کرد).

(الف) $E < V_0$: «بازتاب کلـی». مـتقیماً می‌تـوان عمومی‌ترین پاسخ معادلهٔ شرودینگر را کـه برای آن تمام مقادیر ممکن انرژی ذره کوچکتر از V_0اند نوشت:

$$\psi(x,t) = \int^{K_0} dk\, g(k)\varphi_k(x) \times \exp[-iE(k)t/\hbar]. \tag{۳۵}$$

این پاسخ عمومی‌ترین برهم‌نهش خطی ویـژه تابعهای $\varphi_k(x)$ هامیلتونی کل است کـه هر یک از آنها در عامل متناظر $\exp(-iEt/\hbar)$ ضرب شده‌اند. با استفاده از رابطهٔ (۳۰) برای $\varphi_k(x)$، فرمول (۳۵) به صورت زیر درمی‌آید:

$$\begin{aligned} \psi(x,t) &= \theta(-x)\int_0^{K_0} dk\, g(k)\exp[i(kx - \omega(k)t)] \\ &+ \theta(-x)\int_0^{K_0} dk\, g(k) \times \exp[-i(2\alpha(k) + kx + \omega(k)t)] \\ &+ \theta(x)\int_0^{K_0} dk\, g(k)2\cos\alpha(k) \times \exp[-x(K_0^2 - k^2)^{1/2}] \\ &\times \exp[-i(\alpha(k) + \omega(k)t)] \end{aligned} \tag{۳۶}$$

که طبق معمول در آن،

$$\omega(k) = \hbar k^2/2m. \tag{۳۷}$$

می‌توانیم عملیات خود را با تابع ضریب نامشخص

$g(k)$ ادامه دهیم و سرانجام نشان دهیم که برای توصیف مسئلهٔ پراکندگی مورد نظر، باید انتخاب کنیم

$$g(k) \equiv f(k) \qquad (۳۸)$$

کــه در آن $f(k)$ تــابــع ضریب بسته مــوج فــرودی است (که فرض می‌شود در همان زمانهای اولیه معلوم است). جهت صرفه جویی در استدلالهای صوری غیر ضروری، مستقیماً به شناسایی (۳۸) می‌پردازیم.

پس تابع مــوج $\psi(x,t)$ به صورت مجموع سه بسته موج ظاهر می‌شود که همگی بــا یک تابع ضریب $f(k)$ ساخته شده‌انــد. پیشینه‌های ایــن بسته موجها را می‌توان بــه وسیلهٔ شرط فازمانا (بخش ۲.۱.۲) به دست آورد. از آنجا کــه $f(k)$ حقیقی فــرض شده، این شرط را می‌توان برای اولین بسته موج به صورت

$$x - \omega'(k_0)t = 0 \qquad (\text{۳۹ الف})$$

و برای دو بسته موج دیگر به صورت

$$2a'(k_0) + x + \omega'(k_0)t = 0 \qquad (\text{۳۹ ب})$$

$$a'(k_0) + \omega'(k_0)t = 0 \qquad (\text{۳۹ ج})$$

نوشت. پس مرکز اولین بســته موج در فضای مکان، در

$$x_1 = \frac{\hbar k_0}{m} t \qquad (\text{۴۰ الف})$$

و مرکز بسته موج دوم در

$$x_2 = -\frac{\hbar k_0}{m} t + \frac{2}{(K_0^2 - k_0^2)^{1/2}} \qquad (\text{۴۰ ب})$$

است [$a'(k_0)$ را مــی‌توان از روی تعریف $a(k)$ در رابطهٔ (۲۹) محاسبه کرد]. و اما بسته مــوج سوم منتشر نمی‌شود، همچنانکــه در مــورد «امواج میرا» همواره چنین است؛ این بسته موج تنها درطول یک فاصله زمانی کوتاه حول $t = t_3$ وجود دارد، که

$$t_3 = \frac{m}{\hbar k_0} \frac{1}{(K_0^2 - k_0^2)^{1/2}}. \qquad (۴۱)$$

ابتدا زمانهای منفی بــزرگ را در نظر می‌گیریم. برای چنین زمانهایی x_1 بزرگ و منفی، و x_2 بزرگ و مثبت است. ولی در فرمول (۳۶) بسته موجهای متناظر در $\theta(-x)$ ضرب می‌شوند. این بدان معناست که مقدار مثبتی که برای x_2 پیدا مــی‌شود، غیر فیزیکی است. به عبارت دیگر، موجهایی کــه دومین بسته موج را تشکیل می‌دهند، با تداخل مخرب خود در تمام قلمرو مورد نظر $(x < 0)$ یکدیگر را خنثی می‌کنند. نتیجه می‌گیریم که به ازای t ی بــزرگ و منفی، تنها بسته موج اول وجود دارد، و محل مرکز آن، x_1، در آغاز از $-\infty$ شروع به حرکت می‌کند و با سرعت $\hbar k_0/m$ به سمت راست منتشر می‌شود؛ به این ترتیب این بسته موج حرکت ذره را پیش از آنکه پلهٔ پتانسیل را حس کند، بدرستی بیان می‌کند، و بنابراین باید آن را به عنوان بسته موج فرودی شناخت. [دلیل انتخاب $f(k)$ به عنوان تابع ضریب $\psi(x,t)$ در همین جاست؛ رک رابطهٔ (۳۸).]

برعکس، برای زمانهای بزرگ مثبت، x_1 و x_2 به نحوی جابجا می‌شوند کــه x_2 این بار منفی و در نتیجه فیزیکی است، و x_1 مثبت و غیر فیزیکــی است: به ازای t ی بزرگ و مثبت تنها دومین بسته مــوج فرمول (۳۶) وجود دارد. ایــن بسته، یک بسته مــوج بازتابیده است، زیرا پیشینهٔ آن با سرعتی کــه (قدر مطلق آن) برابر مورد قبل است، درجهت x هــای منفی حرکت می‌کند. از این گذشته، بسته موج بازتابیده تصویر آینه‌ای بسته مــوج فرودی است وهمان شکل و اندازه را دارد (فرض می‌کنیم پاشیدگی بسته موج درطول بــازهٔ زمانی مورد نظر قابل چشم‌پوشی باشد (گلدبرگروواتسون ۱۹۶۲ ، ص ۶۳)).

همچنانکه قبلاً اشاره شد، سومین بسته موج فرمول (۳۶) تنها در طول بــازهٔ زمانی کــوتاهی، نزدیک به $t = 0$ (رک فرمول (۴۱)) حضور محسوس و مؤثری دارد. واقعیت این است کــه هــر سهٔ ایــن بسته موجها حول $t = 0$ باهم وجود دارند: $t = 0$ زمانی است که مرکز بسته مــوج فرودی به سد می‌رسد (فرمول (۴۰ الف))؛ در طی یک بازهٔ معین

$$\Delta t \simeq \Delta x / (\hbar k_0/m) \qquad (۴۲)$$

که در آن $\Delta x \simeq 1/\Delta k$ پهنای بسته موج فرودی است، ذره در ناحیهٔ سد جایگزیده است و هر سه جملهٔ فرمول (۳۶) در تابع موج سهیم‌اند.

اکنون توصیف مکــانیک ـ کــوانتومــی فرایند پراکندگی را درحالتی که (متوسط) انرژی ذره کوچکتر از ارتفاع پلهٔ پتانسیل باشد، خلاصه مــی‌کنیم. به ازای $t < 0$ یک بسته موج فرودی (متناظر بــا جملهٔ e^{+ikx} درفرمول (۳۰)) باسرعتی برابر باسرعت ذره‌ای با اندازه حرکت (تکانهٔ) متوسط $\hbar k_0$ ازسمت چپ به‌سمت راست حرکت می‌کند. برخورد عملاً در حوالی $t = 0$ صورت می‌گیرد و به مدت Δt، از مرتبهٔ (۴۲)، طول می‌کشد. در این فاصله زمانی، تابع موج نسبتاً پیچیده است؛ بخصوص، احتمال حضور ذره درناحیهٔ $x > 0$ (که به طور کلاسیکی ممنوع است) صفر نیست. پس از گذشت این زمان، وضعیت بار دیگر ساده می‌شود: یک بسته موج بازتابیده (متناظر

با جملهٔ e^{-ikx} در فرمول (۳۰)) که اندازه و شکل آن با بستهٔ فرودی یکسان است، با همان سرعت از سد دور می‌شود. با این همه، بازتاب موجب یک تأخیر زمانی می‌شود (رک فرمول (۴۰ب)) که به‌جابجایی فاز (۲۹) بین جملهٔ e^{+ikx} و جملهٔ e^{-ikx} مربوط است؛ از لحاظ فیزیکی، این تأخیر زمانی را می‌توان به این واقعیت ارتباط داد که ذره هنگام برخورد می‌تواند در ناحیهٔ $x>0$ نفوذ کند.

(ب) $E>V_0$: «بازتاب پاره‌ای». اکنون مورد جالبتری را درنظر می‌گیریم که انرژی ذره بیشتر از پلهٔ پتانسیل باشد (وتفاوت این‌دو آن اندازه هست که $f(k)$ به ازای تمام $k<K_0$ صفر باشد).

در مقایسه با مورد قبل، دراینجا به دلیل واگنی دوگانهٔ هرمقدار k، باید یک گزینش دیگر انجام داد. البته این گزینش با توجه به تجربهٔ حاصل از بخش قبل، بسیار آسان است: تابع موجی که فرایند پراکندگی را بیان می‌کند، باید تنها با ویژه تابعهای مانای $\varphi_k^{(1)}$ ساخته شوند:

$$\psi(x,t) = \int_{K_0}^{\infty} dk f(k)\varphi_k^{(1)}(x)\exp[-iE(k)t/\hbar]. \tag{۴۳}$$

با استفاده از رابطهٔ (۳۲ الف) برای $\varphi_k^{(1)}$ به‌دست می‌آید

$$\begin{aligned}\psi(x,t) &= \theta(-x)\int_{K_0}^{\infty} dk f(k)\exp[i(kx-\omega(k)t)] \\ &+ \theta(-x) \\ &\times \int_{K_0}^{\infty} dk f(k)A_1(k)\exp[-i(kx+\omega(k)t)] \\ &+ \theta(x)\int_{K_0}^{\infty} dk f(k)B_1(k) \\ &\times \exp\{i[(k^2-K_0^2)^{1/2}x-\omega(k)t]\}\end{aligned} \tag{۴۴}$$

که $A_1(k)$ و $B_1(k)$ با فرمولهای (۳۳) داده شده‌اند.

همانند قسمت (الف) در بالا، شرط فاز مانا مکان مرکز هریک از سه بسته موج را که درفرمول (۴۴) ظاهر می‌شوند، به دست می‌دهد. چون در اینجا $A_1(k)$ و $B_1(k)$ حقیقی‌اند، برای دو بسته موج اول به دست می‌آید

$$x_i = \frac{\hbar k_0}{m}t \tag{۴۵ الف}$$

$$x_r = -\frac{\hbar k_0}{m}t. \tag{۴۵ ب}$$

و برای بسته موج سوم،

$$x_t = \frac{\hbar(k_0^2-K_0^2)^{1/2}}{m}t \tag{۴۵ ج}$$

با بحثی شبیه به بحث فرمول (۴۰) نتیجه می‌شود به ازای $t<0$ و به اندازهٔ کافی بزرگ، تنها یک بسته موج فرودی وجود دارد (که مرکز آن در x_i است و با جملهٔ e^{+ikx} در فرمول (۳۲ الف) ساخته می‌شود)؛ در زمانهای مثبت و به اندازهٔ کافی بزرگ، تنها یک بسته موج بازتابی (که مرکز آن در x_r است و با جملهٔ e^{-ikx} در (۳۲ الف) ساخته می‌شود) ویک بسته موج عبوری (که مرکز آن در x_t است و با جملهٔ $\exp[i(k^2-K_0^2)^{1/2}x]$ ساخته می‌شود) وجود دارند. برای بازتاب یا عبور هیچ تأخیر زمانی وجود ندارد (زیرا ضرایب $A_1(k)$ و $B_1(k)$ حقیقی‌اند). بسته موجهای فرودی وبازتابی بترتیب با سرعتهای $+\hbar k_0/m$ و $-\hbar k_0/m$ منتشر می‌شوند، و سرعت بسته موج عبوری $\hbar(k_0^2-K_0^2)^{1/2}/m$ است (که با اندازه حرکت (تکانهٔ) ذره در ناحیهٔ سمت راست، که درآن ناحیه انرژی پتانسیل $+V_0$ می‌شود، مناسبت دارد).

۴.۳. احتمال بازتاب و عبور. در یک فرایند پراکندگی یک بعدی، ذرهٔ فرودی یا فقط می‌تواند به پشت سد پتانسیل برود (عبور)، یا مسیر خود را برگردد (بازتاب). ما به جای سطح مقطع پراکندگی، احتمالهای عبور وبازتاب را محاسبه می‌کنیم.

۱.۴.۳. محاسبهٔ صحیح. احتمال بازتاب (عبور) به صورت احتمال یافتن ذره دربسته موج بازتابیده (عبوری) تعریف می‌شود، مشروط به‌اینکه بسته موج فرودی بهنجار به واحد شده باشد.

درمورد انرژی پایینتر، $E<V_0$، روشن است که احتمال عبور برابر صفر واحتمال بازتاب برابر ۱ است: این نتیجه‌ای است که درمکانیک کوانتومی به‌طور طبیعی ازاین واقعیت حاصل می‌شود که بسته موج بازتابی همان شکل و اندازه‌ای را دارد که موج فرودی داشته است واینکه بسته موج عبوری اصلا وجود ندارد.

درمورد انرژی بالاتر، $E>V_0$، وضعیت به این سادگی نیست. فرض کنیم پهنای Δkی تابع ضریب $f(k)$ به اندازهٔ کافی کوچک باشد که بتوان از تغییرات $A_1(k)$ و $B_1(k)$ دربازهٔ Δk صرف نظر کرد. این فرض از لحاظ فیزیکی به معنی آن است که عدم قطعیت اندازه‌حرکت (تکانهٔ) ذره درمقیاسی که مشخصات برخورد آن را تعیین می‌کند، قابل توجه و محسوس نیست. دراین صورت می‌توان به جای بسته موجهای بازتابی و عبوری

در رابطهٔ (۲۲)، بترتیب مقادیر زیر را گذاشت:

$$\psi_r(x,t) \simeq A_1(k_0)\int_{K_0}^{\infty} dk f(k) \times \exp[-i(kx+\omega(k)t)]$$ (۴۶الف)

$$\psi_t(x,t) \simeq B_1(k_0)\int_{K_0}^{\infty} dk f(k) \times \exp\{i[(k^2-K_0^2)^{1/2}x-\omega(k)t]\}.$$ (۴۶ ب)

بنابر فرمول (۴۶ الف)، بسته موج بازتابیده همان شکل بسته موج فرودی را دارد (به‌عبارت دقیقتر، همانند تصویر آینه‌ای آن است)، ولـی ابعاد آن با یک عامل کلی $A_1(k_0)$ کوچک شده است:

$$\psi_r(x,t) \simeq A_1(k_0)\psi_i(-x,t).$$ (۴۷)

بآسانی نتیجه می‌شود که احتمال بازتاب R برابراست با

$$R(k_0) = |A_1(k_0)|^2.$$ (۴۸)

مقایسهٔ بسته موج عبوری (۴۶ ب) بـا بسته موج فرودی به این آسانی نیست. از طرف دیگر، نمی‌توانیم همانند آنچه درمورد $B_1(k)$ کردیم، k_0 را به‌جای k قرار دهیم زیرا دقیقاً تغییرات فاز با k است‌که بر تداخل بین امواج مختلف حاکم‌است. ولی، با استفادهٔ مجدد از این واقعیت که Δk کوچک است، $(k^2-K_0^2)^{1/2}$ را تا اولین درجهٔ $(k-k_0)$ بسط می‌دهیم:

$$(k^2-K_0^2)^{1/2} \simeq (k_0^2-K_0^2)^{1/2} + (k-k_0)\frac{k_0}{(k_0^2-K_0^2)^{1/2}}.$$ (۴۹)

این‌تقریب درهمان شرایطی که روش فاز مانا معتبر است، اعتبار دارد. با قراردادن

$$q_0 = (k_0^2-K_0^2)^{1/2}$$ (۵۰)

به دست می‌آوریم

$$\psi_t(x,t) \simeq B_1(k_0)\exp(iq_0x)\exp(-ik_0^2x/q_0) \times \int_{K_0}^{\infty} dk f(k)\exp\left[i\left(k\frac{k_0}{q_0}x-\omega(k)t\right)\right].$$ (۵۱)

تنها قدر مطلق $\psi_t(x,t)$ مورد نظر ماست، که می‌توان آن را بصورت زیر نوشت:

$$|\psi_t(x,t)| \simeq B_1(k_0)\left|\psi_i\left(\frac{k_0}{q_0}x,t\right)\right|.$$ (۵۲)

احتمال کل مربوط به بسته موج عبوری، احتمال عبور T را به دست می‌دهد:

$$T(k_0) = \int_{-\infty}^{\infty} dx|\psi_t(x,t)|^2 \simeq |B_1(k_0)|^2\frac{q_0}{k_0} \times \int_{-\infty}^{\infty} dx'|\psi_i(x',t)|^2 = \frac{q_0}{k_0}|B_1(k_0)|^2$$ (۵۳)

زیرا فرض کردیم بسته موج فرودی بهنجار به‌واحد شده است. به‌این‌ترتیب، احتمال عبور برابر مجذور قدرمطلق ضریب $B_1(k_0)$ نیست! باید آن را در نسبت اندازه حرکت (تکانهٔ) q_0/k_0 ضرب کرد. این ضریب اخیر از آنجا ناشی می‌شود کـه بسته موج عبوری باریکتر است از بسته موج فرودی:

$$\Delta x_t = \frac{q_0}{k_0}\Delta x_i$$ (۵۴)

وهمچنانکه می‌توان بآسانی از روی فرمولهـای (۳۳) تحقیق کرد، بقای (پایستگی) احتمال را تضمین می‌کند:

$$R(k_0) + T(k_0) = 1$$ (۵۵)

۲.۳.۳. محاسبهٔ ساده‌تـری بـر اساس «تعبیر ناکامل» موج تخت. اگر «تعبیر ناکاملی» را کـه در بخش ۳.۲.۲ بیان شد بـه مجموع چندین موج تخت نظیر (۳۲ الف) تعمیم دهیم، می‌توانیم نتایج (۴۸) و (۵۳) در مـورد احتمال بازتاب وعبور را با محاسبهٔ مستقیم‌تری به دست آوریم.

استدلال از این قرار است: فرض می‌شود فرایند پراکندگی به‌یک حالت پایا رسیده باشد: باریکهٔ مداومی از ذرات فرودی به سد پتانسیل برمی‌خورند وسد آن را به‌یک باریکهٔ عبوری ویک‌باریکهٔ بازتابی تقسیم می‌کند. دراین صورت احتمالهای عبور وبازتاب به‌صورت شدتهای باریکه‌های متناظرتقسیم‌برشدت فرودی، عینیت می‌یابند.

در فـرمول (۳۲ الف) جمله e^{ikx} را بـه عنوان نمایش دهندهٔ باریکـهٔ فـرودی و جملات e^{-ikx} و $\exp[i(k^2-K_0^2)^{1/2}x]$ را بترتیب بـه عنوان نمایش دهندهٔ باریکه‌های بازتابی وعبوری درنظر گـرفتیم. پس شار فرودی به‌صورت $N|\mathbf{j}_i|$ است که

$$|\mathbf{j}_i| = \frac{\hbar k}{m}$$ (۵۶)

برابر است با قدر مطلق جریان احتمال مـربوط به جملهٔ e^{ikx}. به همین ترتیب، شار بازتابی وشار عبوری عبارتند از $N|\mathbf{j}_r|$ و $N|\mathbf{j}_t|$، که

$$|\mathbf{j}_r| = \frac{\hbar k}{m}|A_1(k)|^2$$ (۵۷ الف)

$$|\mathbf{j}_t| = \frac{\hbar(k^2 - K_0^2)^{1/2}}{m} |B_1(k)|^2. \quad (\text{۵۷ ب})$$

سپس احتمالهای بازتاب وعبور باتقسیم شار بازتابی و عبوری برشار فرودی به دست می‌آیند. عامل مشترک N حذف می‌شود و نتیجه می‌شود

$$R = \frac{|\mathbf{j}_r|}{|\mathbf{j}_i|} = |A_1(k)|^2 \quad (\text{۵۸ الف})$$

$$T = \frac{|\mathbf{j}_t|}{|\mathbf{j}_i|} = \frac{(k^2 - K_0^2)^{1/2}}{k} |B_1(k)|^2. \quad (\text{۵۸ ب})$$

این مقادیر در واقع همانهایی هستند که دربخش ۱.۳.۲ به دست آوردیم.

۳.۳.۲. مقایسهٔ انتقادی دو روش. نیازی به تأکید نیست که روش ساده شدهٔ بخش ۲.۳.۲ در مقایسه با روش بخش ۱.۳.۲ باعث می‌شود مقدار زیادی در «انرژی محاسبه» صرفه جویی شود. دلیل این امر عمدتاً آن است که این روش کاری به بسته موجها ندارد و مستقیما به تابع موجهای مانا می‌پردازد.

ولی باید دانست که این روش ساده شده، ازلحاظ اصول بنیادی صحیح نیست. تصویر فیزیکی آزمایشی که با باریکهٔ فرودی پایا انجام شود کاملاقابل قبول است، به شرطی که بتوان برهم‌کنشهای بین ذرات تشکیل دهندهٔ باریکه را نادیده گرفت، وفرض کرد هر ذره طوری رفتار می‌کند که گویی تنهاست. همچنانکه قبلا در بخش ۳.۲.۲ (ب) بحث شد، قسمت نادرست استدلال، وابسته کردن باریکهٔ ذرات به تابع موج یک ذره است. محاسبهٔ بخش ۲.۳.۲ عملا برپایهٔ تعبیری است که حتی ازاین‌هم غیرمجازتر است، زیرا به هرجمله ازتابع موج مانای $\varphi_k^{(1)}(x)$ یک باریکه وابسته شده است. دربارهٔ جملات تداخلی چه می‌توان گفت؟ از فرمول (۳۲ الف) بآسانی به دست می‌آید

$$|\varphi_k^{(1)}(x)|^2 = \theta(-x)[1 + A_1^2(k) + 2A_1(k)\cos 2kx] + \theta(x)B_1^2(k) \quad (\text{۵۹ الف})$$

$$\frac{\hbar}{2mi}\left(\varphi_k^{(1)*}\frac{d}{dx}\varphi_k^{(1)} - \varphi_k^{(1)}\frac{d}{dx}\varphi_k^{(1)*}\right) = \theta(-x)\frac{\hbar k}{m}[1 - A_1^2(k)] + \theta(x)\frac{\hbar(k^2 - K_0^2)^{1/2}}{m}B_1^2(k). \quad (\text{۵۹ ب})$$

«جملهٔ عبوری» $\exp[i(k^2 - K_0^2)x]^{1/2}$ با تابع θ از دوجملهٔ دیگر جدا شده است وهمانند یک تک موج تخت رفتار می‌کند (بخش ۳.۲.۲). در مورد «جملهٔ فرودی» e^{+ikx} و «جملهٔ بازتابی» e^{-ikx}، دیده می‌شود که این جملات در (۵۹ ب) تداخل نمی‌کنند ولی در (۵۹ الف) تداخل می‌کنند. یک چنین جملهٔ تداخلی هیچ ربطی به فرایند واقعی پراکندگی ندارد؛ در توصیف صحیح بخش ۱.۳.۲، بسته موجهای فرودی و بازتابی تداخل نمی‌کنند، زیرا جز دریک فاصله زمانی کوتاه حول $t = 0$ این دو دریک زمان با هم نیستند، حتی در «تعبیر ناکامل»، مشکل بتوان تصور کرد که دو باریکهٔ مختلف یک نقش تداخلی بسازند.

پس اعتبار روش ساده شدهٔ بخش ۲.۳.۲ دقیقاً به حصول مقادیر درست برای احتمالهای عبور و بازتاب محدود می‌شود. بعلاوه، این اعتبار محدود تنها می‌تواند برمبنای مقایسه با محاسبهٔ صحیح مکانیک ـ کوانتومی باشد؛ تنها دلیل اینکه چرا فرمولهای (۵۸) ارزش دارند آن است که نتایج صحیح (۴۸) و (۵۳) را به دست می‌دهند.

البته این بدان معنا نیست که «روش ناکامل» را نباید به‌کار برد، ویا احتمالا نباید آن را درسطح مقدماتی تدریس کرد. اولا، با این روش، محاسبات آنقدر ساده‌تر می‌شود که استفاده نکردن از آن، هنگامی که تنها نتایج نهایی مورد نظر باشد، اشتباه است. بعلاوه، اگر به «تعبیر ناکامل» به‌عنوان یک نوع شکل کوتاه شدهٔ توصیف درست فرایند فیزیکی نگاه شود، عملا بسیار سودمند خواهد بود.

جریان احتمال وابسته به هریک ازسه جملهٔ فرمول (۳۲ الف) جداگانه محاسبه می‌شوند،زیرا بسته موجهایی که بااین‌جملات ساخته می‌شوند، بجز درجریان برخورد، عملا درزمان و / یادرمکان ازیکدیگرجدا هستند (رک بخش ۲.۲.۲)، وجریان احتمال (ونه چگالی احتمال) کمیتی است که باید برای تقلید از روش صحیح از آن استفاده کرد. به این ترتیب آنچه که اساساً یک دستورالعمل است، می‌تواند به صورت ابزار کارآمدی درآید، مشروط بر آنکه کسی درمورد ماهیت واقعی آن دچار اشتباه نشود.

۴ تعمیم ونتیجه‌گیری

ما معنای فیزیکی و استفادهٔ عملی موج تخت و بسته موج را درتوصیف مکانیک ـ کوانتومی دستگاههای تک ذره‌ای بررسی‌کردیم. انگیزه‌های ما اساساً آموزشی بودند، زیرا این مفاهیم معمولا دراولین مراحل درسهای مقدماتی مکانیک کوانتومی به منظور نشان‌دادن تفاوتهای آن بامکانیک کلاسیک وآشناکردن دانشجو با پدیده‌های

فیزیکی تازه، معرفی می‌شوند.

پس از یادآوری چند نتیجه و فرمول سودمند، توجه خود را بر یک مسئلهٔ مشخصاً ساده متمرکز کردیم و آن را بتفصیل مطالعه کردیم. حل صحیح مکانیک ـ کوانتومی این مسئله را برپایهٔ بررسی بسته موج تشریح کردیم، وسپس نشان دادیم که چگونه نتایج نهایی را می‌توان با محاسبهٔ بسیار ساده‌تری، از طریق استفادهٔ مستقیم از «تابع موجهای» مانا و جریان احتمال آنها به دست آورد. مهمترین نکات حاصل ازمقایسهٔ این دو روش را می‌توان به صورت زیر خلاصه کرد. محاسبهٔ دوم مشخصاً نادرست است، و باید به همین عنوان به دانشجو ارائه شود، ولی درعین حال به قدری ساده است که نمی‌توان آن را کنار گذاشت. راه حل (آموزشی) این مشکل احتمالا استفاده از این روش «ناکامل» است، ولی آموختن آن به عنوان نوعی خلاصهٔ روش صحیح. به هرحال، از لحاظ آموزشی، چندان جایز نیست که مشکل به طورکلی نادیده گرفته شود، چنانچه اغلب چنین می‌شود.

اگرچه ملاحظات بخش ۳ را فقط برای مورد خاص پلهٔ پتانسیل به دست آوردیم، آنها را می‌توان بآسانی در هرمسئلهٔ پتانسیل مربعی یک بعدی دیگر نیز به کار برد، وحتی دامنهٔ آنها عملا تا وضعیتهای واقعی‌تر نیز گسترده است.

درهر فرایند برخورد، ذرات اولیه، اگر مدتها قبل از وقوع برخورد درنظر گرفته شوند، و همچنین ذرات نهایی، مدتها پس ازبرخورد، آزادند. درنتیجه، هراندازه هم که تحول دستگاه در جریان برهم‌کنش واقعی پیچیده باشد، توصیف حالتهای اولیه و نهایی، مانند آنچه در بالا مطالعه شد، برپایهٔ بسته موجهای آزاد استوار است.

به عنوان مثال پراکندگی یک ذرهٔ بدون اسپین به جرم m را توسط یک پتانسیل نرداری $V(\mathbf{r})$ در سه بعد درنظر بگیرید. ذرهٔ ورودی از ناحیهٔ منفی و دور درامتداد محور zها می‌آید. اگر فرض شود که $V(\mathbf{r})$ در بینهایت سریعتر از $1/r$ به صفر میل می‌کند، «تابع موجهای» مانای $u_k(\mathbf{r})$ وجود خواهند داشت که ویژه تابعهای هامیلتونی کل با ویژه مقدارهای $E(k) = \hbar^2k^2/2m$ باشند و رفتار مجانبی آنها به صورت زیر باشد:

$$u_k(\mathbf{r})_{r\to\infty} \sim e^{ikz} + F_k(\theta,\varphi)\frac{e^{ikr}}{r}. \quad (۶۰)$$

در این رابطه θ و φ زاویه‌های قطبی معمولی هستند و $F_k(\theta,\varphi)$ دامنهٔ پراکندگی خوانده می‌شود. برای توصیف حرکت ذره، باید تابع موج آن در یک لحظهٔ معین را روی «تابع موجهای» مانا بسط داد وسپس این بسط را متناظراً با ضرایب $e^{-iE(k)t/\hbar}$ تکمیل کرد. رابطه‌ای نظیر

$$\psi(\mathbf{r},t) = \int_0^\infty dk f(k) u_k(\mathbf{r}) \exp[-iE(k)t/\hbar] \quad (۶۱)$$

را که درآن تابع ضریب $f(k)$ همانند بخش ۲-۱۰۲ فرض شده، بررسی می‌کنیم. بنا به رابطهٔ (۶۰) این تابع موج مجانباً به مجموع یک بسته موج تخت و یک بسته موج پراکنده نزدیک می‌شود:

$$\psi(\mathbf{r},t)_{r\to\infty} \sim \int_0^\infty dk f(k) e^{ikz} \exp[-iE(k)t/\hbar] + \int_0^\infty dk f(k) F_k(\theta,\varphi)\frac{e^{ikr}}{r} \times \exp[-iE(k)t/\hbar]. \quad (۶۲)$$

گرچه جملهٔ دوم دقیقاً به شکلی که قبلا مطالعه کردیم نیست، می‌توان هردوجمله را با روش فاز مانا (بخش ۲-۱۰۲) بررسی کرد. بنابراین مکان مرکز بسته موج اول در

$$z_p(t) = \frac{\hbar k_0}{m}t \qquad x_p = y_p = 0 \quad (۶۳)$$

است. درمورد بسته موج پراکنده، محل بیشینهٔ آن به‌امتداد انتخاب شدهٔ (θ,φ) بستگی دارد؛ فاصلهٔ بین این بیشینه ومبدأ دستگاه مختصات از رابطهٔ زیر به دست می‌آید:

$$r_p(\theta,\varphi;t) = -\delta'_{k_0}(\theta,\varphi) + \frac{\hbar k_0}{m}t \quad (۶۴)$$

که در آن $\delta'_k(\theta,\varphi)$ مشتق فاز دامنهٔ پراکندگی $F_k(\theta,\varphi)$ نسبت به k است. این فرمولها تنها درناحیهٔ مجانبی (یعنی به ازای $|t|$ی بزرگ) معتبرند، و بحث درمورد آنها همان روال بحث بالا را دارد. به ازای مقادیر بزرگ و منفی t بسته موج پراکنده وجود ندارد: امواجی که چنین بسته موجی را می‌سازند تنها به ازای مقادیر منفی r تداخل سازنده می‌کنند، و بدیهی است که چنین چیزی مجاز نیست. بنابراین تنها چیزی که مدتی طولانی قبل از برخورد می‌توان یافت بسته موج تخت است، که باید آن را همان بسته موج ورودی شناخت. به ازای مقادیر بزرگ ومثبت t، هر دوبسته موج عملاً حضور دارند: اولی درطول مسیر بستهٔ ورودی حرکت می‌کند و دومی در تمام جهات پخش می‌شود. پس سطح مقطع پراکندگی را

می‌توان با توجه به این سه بسته موج پیدا کرد. (درعمل باید برای بردار موج ورودی **k**، جهات دیگری را کـه انـدکی با جهت مـذکور تفاوت دارند مجاز دانست تا بسته موج تخت نه تنها درطول Oz بلکه درامتدادهـای عمود بر آن نیز محدود شود.) دراینجا نیز با استفاده از «شارهٔ احتمال» و «تعبیر ناکامل» حالت ماناى متناظـر، می‌توان همین نتیجه را با سهولت بیشتری به دست آورد (کوهن - تانوجی و دیگران ۱۹۷۷، ص ۹۱۲).

بدین‌ترتیب سؤالات وبحثهایی‌را که در این مقاله طـرح و بررسی شدند، عملا می‌توان در حوزه‌ای بسیار گسترده‌تراز‌مسایل پتانسیل مربعی یک بعدی به‌کار برد.

ترجمهٔ حسین فلسفی

• Plane Waves and Wave Packets in Elementary Quantum Mechanics Problems
B. Diu
Laboratoire de Physique Théorique et Hautes Energies, Université Paris VII, 2 Place Jussieu, 75221 Paris Cedex 05, France
Eur. J. Phys. (1980) L231

مراجع

1. Cohen-Tannoudji C., Diu B. and Laloe F. 1977 *Quantum Mechanics* (Paris: Hermann; New York: Wiley).
2. Goldberger M. L. and Watson K. M. 1964 *Collision theory* (New York: Wiley)