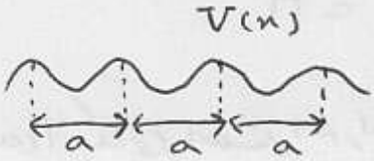
۴-۳ - انتقال شبکه به عنوان یک عملگر تقارنی گسسته

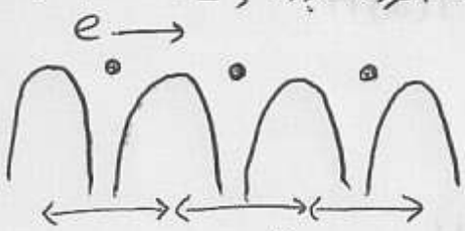
کاربرد این عملگر را در فیزیک ماده چگال و مواد بلوری می توان مشاهده کرد. یک مثال واقعی برای کاربرد این عملگرها در حین حرکت الکترون در زنجیره‌ای از یون های مثبت با فاصله یکسان است.

پتانسیل تناوبی

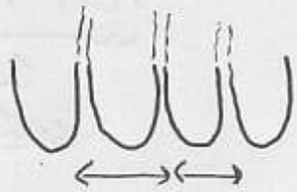


$V(x+a) = V(x)$

* الکترون عبوری پتانسیل متناوب را درک می کند.



$V = -\frac{e^2}{r}$



در شکل های فوق، نشان داده می شود که پتانسیل تناوبی و با نظم مشخص در حال تکرار است: $V(x) = V(x+a)$. در اینجا، a را فاصله شبکه گویند.

توجه داشته باشید که هامیلتونی تحت انتقال $T(l)$ با l دلخواه ناوردا نیست.

$T(l)$ عملگر انتقال به اندازه l است.

$$T(l)|x'\rangle = |x'+l\rangle$$

$$T^{+}(l)\, x\, T(l) = x + l$$

امّا، اگر l بر فاصله شبکه a منطبق شود، خواهیم داشت:

$$T^{+}(a)\, V(x)\, T(a) = V(x+a) = V(x)$$

نکته: عملگر انرژی جنبشی $\frac{p^2}{2m}$ همان $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ است و بدیهی است که تحت هر انتقالی ناوردا است.

پس تحت عملگر انتقال a ، هم $\frac{p^2}{2m}$ و هم $V(x)$ ناوردا می‌مانند.

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

درنتیجه می‌توان گفت که هامیلتونی تحت انتقال $T(a)$ ناورداست. یعنی

$$T^{\dagger}(a)\, H\, T(a) = H$$

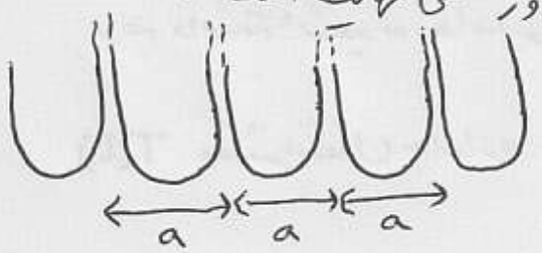
از آنجا که $T(a)$ یکانی است، به راحتی می‌توانیم با ضرب کردن $T(a)$ در طرفین به دست آوریم

$$\underbrace{T(a)\, T^{\dagger}(a)}_{\substack{1 \\ \text{یکانی}}}\, H\, T(a) = T(a)\, H$$

$$H\, T(a) = T(a)\, H$$

$$[H, T(a)] = 0$$

قبل از مطالعه دقیق‌تر $T(a)$ ، حالت خاصی از پتانسیل های تناوبی را در نظر بگیرید که در آن ارتفاع سد بین راس ها مجاور بی‌نهایت است.



حالت پایه چیست؟

حالتی که در آن، ذره در یکی از راس های شبکه کاملاً جایگزیده باشد می‌تواند نامزدی برای حالت پایه باشد.

اگر ذره در راس nام جایگزیده باشد، این حالت را با کت $|n\rangle$ نشان می‌دهیم

در مورد حالت پایه $|n\rangle$ می‌توان نوشت:

$$H|n\rangle = E_0|n\rangle \quad (E_0 \text{ انرژی حالت پایه})$$

تابع موج حالت پایه که تنها در اطراف $\langle n'|n\rangle =$
رأس n مقدار غیر صفر دارد.

اگر ذره در یکی از رأس های دیگر جایگزیده باشد، یک حالت چیز دیگری است اما

بدیهی است که مقدار انرژی همان E_0 است.

از آنجا که n از $-\infty$ تا $+\infty$ تغییر می‌کند، بی نهایت یک حالت پایه با

ویژه مقدار انرژی یکسان E_0 وجود دارد.

مثال: $|n\rangle$ و $|n-1\rangle$ و $|n+1\rangle$ و $|n+10\rangle$ و $|n-4\rangle$ و ....

بدیهی است که با اثر دادن عملگر انتقال شبکه، $T(a)$ بر روی هر رأس، رأس مجاور بعدی به دست می‌آید.

$$T(a)|n\rangle = |n+1\rangle$$

در نتیجه واضح است که $|n\rangle$ ویژه کت $T(a)$ نمی‌باشد.

در اینجا یک نکته قابل تأمل است.

می‌دانیم $[T(a), H] = 0$ به دست آمده است. با این وجود $|n\rangle$ ویژه کت H است

اما ویژه کت $T(a)$ نمی‌باشد.

در اینجا به دلیل وجود تبهگنی در کت های حالت $|n\rangle$ لزومی بر وجود ویژه کت های

مشترک بین H و $T(a)$ وجود ندارد. (مراجعه کنید به قضیه گفته شده در بخش قبل)

جمع بندی :

با فرض آنکه ارتفاع سد یا عمق چاه در پتانسیل های متناوب بی نهایت باشد، تونل زنی ممکن نمی شود و الکترون در یکی از رأس های شبکه گیر می کند و جایگزیده می شود.

$$H|n\rangle = E_0|n\rangle \quad \text{و} \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

E_0 برای همه حالات پایه N گانه یکسان است.

N حالت فوق، ویژه حالات H با ویژه مقدار مشترک E_0 هستند اما به دلیل وجود تبهگنی، دیگر ویژه حالت $T(a)$ نیستند:

$$T(a)|n\rangle = |n+1\rangle$$

حال هدف ما این است که ویژه کت های همزمان H و $T(a)$ را به دست آوریم.

در اینجا یک ترکیب خطی از $|n\rangle$ ها می سازیم، به گونه ای که ویژه تابع مشترک H و $T(a)$ باشد:

$$|\theta\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\theta}|n\rangle$$

θ پارامتری حقیقی در محدوده $-\pi \leq \theta \leq \pi$ است.

$$H|\theta\rangle = E_0|\theta\rangle \quad (1)$$

از آنجا که همه $|n\rangle$ ها ویژه مقدار انرژی یکسان E_0 دارند می توان نشان داد

$$T(a)|\theta\rangle = T(a)\sum_{-\infty}^{\infty} e^{in\theta}|n\rangle = \sum e^{in\theta}|n+1\rangle \underset{\substack{n+1=n' \\ n=n'-1}}{=} \sum_{-\infty}^{\infty} e^{i(n'-1)\theta}|n'\rangle$$

$$= e^{-i\theta}\sum_{n'=-\infty}^{\infty} e^{in'\theta}|n'\rangle \underset{n'=n}{=} e^{-i\theta}|\theta\rangle \quad (2)$$

$$① \Rightarrow \quad H|\theta\rangle = E_0|\theta\rangle$$

$$② \Rightarrow \quad T(a)|\theta\rangle = e^{-i\theta}|\theta\rangle$$

یک حالت $|\theta\rangle$ ویژه‌کت همزمان H و $T(a)$ است

حال اگر بخواهیم مثال های واقعی تر را حل کنیم، ارتفاع سد یا عمق چاه در پتانسیل های تناوبی را غیربی نهایت در نظر می‌گیریم.

یعنی ارتفاع سد یا عمق چاه زیاد است اما بی نهایت نیست.

درست مانند قبل می‌توانیم یک حالت $|n\rangle$ را بسازیم ولی این بار امکان تونل زنی وجود دارد.

به دلیل وجود تونل زنی کوانتومی، مقداری نشت به رأس های مجاور وجود دارد.

از آنجا که هامیلتونی تحت انتقال $T(a)$ ناوردا است، عناصر قطری ماتریس H در پایه $|n\rangle$ مساوی هستند. یعنی: $\langle n|H|n\rangle = E_0$

اما می‌توان حدس زد که ماتریس H کاملاً قطری نباشد، چرا که نشت به رئوس مجاور وجود دارد.

از آنجا که ارتفاع سد بلند است، انتظار داریم عناصر ماتریسی H بین راس های دور قابل چشم‌پوشی باشد و فقط بین راس های مجاور مهم باشد.

تنها اگر $n = n'$ و $n = n' \pm 1$ $\Longrightarrow \langle n'|H|n\rangle \neq 0$

یعنی فقط برای $n' = n$ و $n' = n \pm 1$ می‌توانیم مقدار غیرصفر برای

عنصر ماتریسی $\langle n'|H|n\rangle$ داشته باشیم. در فیزیک ماده چگال،

این فرض با عنوان "تقریب مقید بودن شدید" شناخته می‌شود.

حال Δ را به صورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$\langle n \pm 1|H|n\rangle = -\Delta$$

Δ مستقل از n است زیرا ناوردایی انتقالی هامیلتونی داریم.

توجه: $|n\rangle$ و $|n'\rangle$ وقتی $n \neq n'$ باشد متعامد هستند.

$$H|n\rangle = E_0|n\rangle - \Delta|n+1\rangle - \Delta|n-1\rangle$$

با توجه به وجود تونل زنی کوانتومی، دیگر $|n\rangle$ ویژه‌کت انرژی نیست.

حال کت $|\theta\rangle$ را در نظر بگیرید:

$$|\theta\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\theta}|n\rangle$$

آیا $|\theta\rangle$ ویژه‌کت همزمان H و $T(a)$ است؟

$$T(a)|\theta\rangle = T(a)\sum e^{in\theta}|n\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\theta}|n+1\rangle =$$

$$\underset{\substack{\text{تغییر متغیر}\\ n'=n+1}}{=} \sum_{n'-1=-\infty}^{\infty} e^{i(n'-1)\theta}|n'\rangle = \sum e^{-i\theta}\sum_{n'=-\infty}^{\infty} e^{in'\theta}|n'\rangle$$

$$\underset{\substack{\text{تغییر متغیر}\\ n'=n}}{=} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-i\theta} e^{in\theta}|n\rangle = e^{-i\theta}|\theta\rangle$$

$T(a)|\theta\rangle = e^{-i\theta}|\theta\rangle \Longrightarrow$ $|\theta\rangle$ ویژه‌کت $T(a)$ است.

$$H|\theta\rangle = H\sum e^{in\theta}|n\rangle = \sum e^{in\theta} H|n\rangle =$$

$$= \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\theta}\left[E_0|n\rangle - \Delta|n+1\rangle - \Delta|n-1\rangle\right]$$

$$= E_0\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\theta}|n\rangle - \Delta\underbrace{\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\theta}|n+1\rangle}_{\substack{\text{تغییر متغیر}\quad n'=n+1\\ n=n'-1}} - \Delta\underbrace{\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\theta}|n-1\rangle}_{\substack{\text{تغییر متغیر}\quad n''=n-1\\ n=n''+1}}$$

$$= E_0\sum e^{in\theta}|n\rangle - \Delta e^{-i\theta}\sum_{n'=-\infty}^{\infty} e^{in'\theta}|n'\rangle - \Delta e^{i\theta}\sum_{n''=-\infty}^{\infty} e^{in''\theta}|n''\rangle$$

$$= E_0\sum e^{in\theta}|n\rangle - \Delta e^{-i\theta}\sum e^{in\theta}|n\rangle - \Delta e^{i\theta}\sum e^{in\theta}|n\rangle$$

$$= E_0\sum e^{in\theta}|n\rangle - \Delta(e^{-i\theta}+e^{i\theta})\sum e^{in\theta}|n\rangle =$$

$$= E_0 \sum e^{in\theta} |n\rangle - \Delta(\cos\theta - i\sin\theta + \cos\theta + i\sin\theta) \sum e^{in\theta} |n\rangle$$

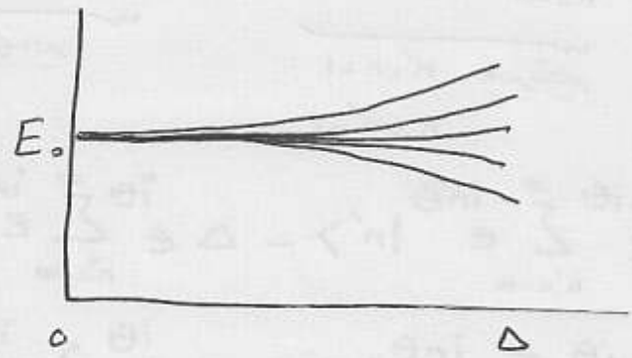
$$= (E_0 - 2\Delta\cos\theta) \sum e^{in\theta} |n\rangle$$

$$H|\theta\rangle = \underbrace{(E_0 - 2\Delta\cos\theta)}_{\text{ویژه مقدار انرژی}} |\theta\rangle \Longrightarrow$$ $|\theta\rangle$ ویژه‌کت H می‌باشد.

* پس $|\theta\rangle$ ویژه‌کت همزمان H و $T(a)$ می‌باشد.

در این حالت (غیرمی‌تهایت بودن ارتفاع سد یا عمق چاه در پتانسیل متناوب)، به دلیل تونل‌زنی کوانتومی و غیرصفر بودن Δ، تبهگنی از بین رفته است.

از آنجا که توزیع پیوسته‌ای برای مقدار انرژی به صورت

$$-1 \leq \cos\theta \leq 1 \Longrightarrow E - 2\Delta \leq \text{ویژه‌مقدار انرژی} \leq E + 2\Delta$$

وجود دارد، ترازهای انرژی به نوار پیوسته انرژی تبدیل می‌شوند.