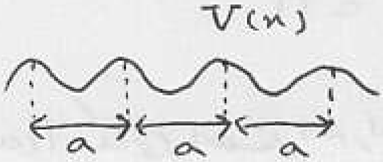
۴-۳- انتقال شبکه به عنوان یک عملگر تقارنی گسسته

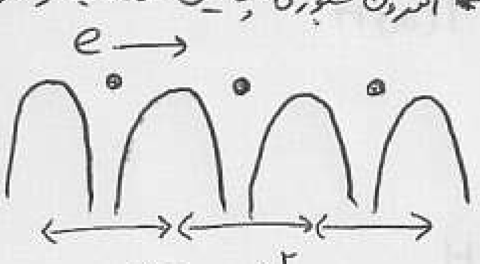
کاربرد این عملگر را در فیزیک ماده چگال و مواد بلوری می توان مشاهده کرد. یک مثال واقعی برای کاربرد این عملگرها درحین حرکت الکترون در زنجیره‌ای از یون های مثبت با فاصله یکسان است.



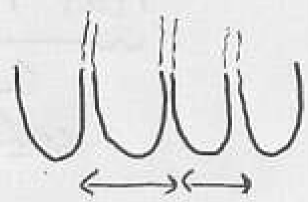
$V(x+a)=V(x)$

پتانسیل تناوبی

* الکترون عبوری پتانسیل متناوب را درک می کند.



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



در شکل های فوق، نشان داده می شود که پتانسیل تناوبی در با نظم مشخص درحال تکرار است: $V(x)=V(x+a)$. دراینجا، 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:

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

$$T^\dagger(l)\, x\, T(l) = x+l$$

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

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

نکته: عملگر انرژی جنبشی $\frac{p^2}{2m}$ همان $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$ 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.

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

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

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

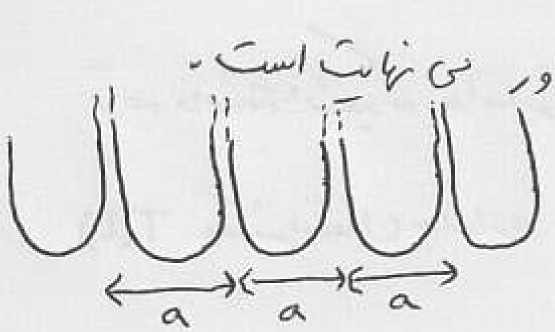
از آنجا که $T(a)$ یکانی است، به راحتی می‌توانیم با ضرب کردن $T(a)$ در طرفین به دست آوریم

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

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

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

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 بی نهایت است.



حالت پایه چیست؟

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

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

در مورد حالت پایه $|n\rangle$ می توان نوشت:

$$H|n\rangle = E_0|n\rangle$$ (E_0 انرژی حالت پایه)

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

اگر ذره در یکی از راس 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 می کند، بی نهایت کت حالت پایه با

ذره، 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 راس، راس مجاور بعدی به دست می آید.

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

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

در اینجا یک نکته قابل تأمل است:

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

اما ویژه کت $T(a)$ نمی باشد.

در اینجا به دلیل وجود دیجنرسی 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 نمی‌شود و الکترون در یکی از رأس های شبکه گیر می‌کند و جایگزیده می‌شود.

$H|n\rangle = E_0|n\rangle$ و $n = 1, 2, 3, \ldots$

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 کت‌های همزمان H و $T(a)$ را به دست آوریم.

در اینجا یک ترکیب خطی از $|n\rangle$ ها می‌سازیم، به گونه‌ای 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.

$$H|\theta\rangle = E_0|\theta\rangle \quad (1) \Longleftarrow$$ از آنجا که همه $|n\rangle$ ها ویژه مقدار انرژی یکسان E_0 دارند می‌توان نشان داد

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

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

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

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

کت حالت $|\theta\rangle$ ویژه کت 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 غیر بی نهایت در نظر می گیریم .

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

درست مانند قبل می توانیم کت 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 آنجاکه هامیلتونی تحت انتقال $T(a)$ ناورداست ، عناصر قطری ماتریس H در پایه $|n\rangle$ مساوی هستند . یعنی: $\langle n|H|n\rangle = E_0$

اما می توان حدس زد که ماتریس H کاملاً قطری نباشد ، چراکه نشت به رئوس مجاور وجود دارد .

از آنجاکه ارتفاع سد بلند است ، انتظار داریم عناصر ماتریسی H بین راس های دور قابل چشم پوشی باشد و فقط بین راس های مجاور مهم باشد .

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

یعنی فقط برای $n'=n$ و $n'=n\pm1$ 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:

$$\langle n\pm1|H|n\rangle = -\Delta$$

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؟

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

از آنجا که توزیع پیوسته‌ای برای مقدار انرژی به صورت

$-1 \le \cos\theta \le 1 \Longrightarrow E - 2\Delta \le$ ویژه مقدار انرژی $\le E + 2\Delta$

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