تابع موج تحت پاریته

کت حالت اولیه $|\alpha\rangle \xrightarrow{\text{پاریته}} \pi|\alpha\rangle$

تابع موج اولیه $\langle x'|\alpha\rangle = \psi_\alpha(x') \xrightarrow{\text{پاریته}} ?$

$$\langle x'|\pi|\alpha\rangle = \int dx'' \langle x'|\pi|x''\rangle\langle x''|\alpha\rangle$$

$$= \int dx'' \langle x'|-x''\rangle \langle x''|\alpha\rangle$$

$$= \int dx'' \delta(x'+x'') \langle x''|\alpha\rangle$$

$$= \langle -x'|\alpha\rangle$$

$$= \psi_\alpha(-x') \quad (1)$$

حال، اگر $|\alpha\rangle$ ویژه‌کت عملگر پاریته باشد، از آنجاکه ویژه‌مقادیر پاریته فقط ± 1 هستند، داریم

$$\pi|\alpha\rangle = \pm|\alpha\rangle \quad (2)$$

$$\left.\begin{array}{l} (1) \Longrightarrow \langle x'|\pi|\alpha\rangle = \langle -x'|\alpha\rangle \\ (2) \Longrightarrow \langle x'|\pi|\alpha\rangle = \pm\langle x'|\alpha\rangle \end{array}\right\} \xrightarrow[\text{یکسان است}]{\text{طرف های چپ}} \langle -x'|\alpha\rangle = \pm\langle x'|\alpha\rangle$$

یا

رابطه ★ $\boxed{\psi(-x') = \pm\psi(x')}$

⊕ تابع موج تحت پاریته زوج است: $\psi(-x') = \psi(x')$

⊖ تابع موج تحت پاریته فرد است: $\psi(-x') = -\psi(x')$

↑ در اینجا، $|\alpha\rangle$ ویژه‌کت عملگر π فرض شده است.

ویژه‌کت تکانه خطی

می‌دانیم $\{\pi, P\} = 0 \longrightarrow [P, \pi] \neq 0 \longrightarrow$ پس π و P ویژه‌کت‌های همزمان ندارند

$\downarrow$

$|P\rangle$ ویژه‌کت π لزوماً نمی‌باشد.

ویژه‌تابع تکانه = ویژه‌کت تکانه در فضای x = موج تخت = $\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ip_0 x/\hbar}$

$\downarrow$

واضح است که در رابطه ☆ نمی‌گنجد یعنی

$\psi(-x') \neq \pm\psi(x')$.

ویژه‌کت تکانه زاویه‌ای مداری

$[L, \pi] = 0 \longrightarrow$ π و L ویژه‌کت همزمان دارند

ویژه‌تابع عملگر تکانه زاویه‌ای مداری با $Y_{\ell m}(\theta,\phi)$ یا $|\ell, m\rangle$ نشان داده می‌شود.

در مختصات کارتزین: $\vec{x} \xrightarrow{\pi} -\vec{x}$ یا $\begin{cases} x \xrightarrow{\pi} -x \\ y \xrightarrow{\pi} -y \\ z \xrightarrow{\pi} -z \end{cases}$

در مختصات کروی: $\begin{cases} r \xrightarrow{\pi} r \\ \theta \xrightarrow{\pi} \pi - \theta \\ \phi \longrightarrow \pi + \phi \end{cases} \Longrightarrow \begin{cases} R(r) \xrightarrow{\pi} R(r) \\ \cos\theta \xrightarrow{\pi} -\cos\theta \\ e^{im\phi} \xrightarrow{\pi} (-1)^m e^{im\phi} \end{cases}$

حال اثر پاریته را بروی $Y_{\ell m}(\theta,\phi)$ بررسی می‌کنیم

می‌دانیم $Y_{lm}(\theta,\varphi) = \frac{(-1)^l}{2^l l!}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l+m)!}{(l-m)!}}\, e^{im\varphi} \frac{1}{\sin^m\theta}\frac{d^{l-m}}{d(\cos\theta)^{l-m}}(\sin\theta)^{2l}$

$$Y_{lm}(\theta,\varphi) \xrightarrow{\pi} (-1)^l Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

$$\Longrightarrow \pi Y_{lm}(\theta,\varphi) = (-1)^l Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

بدیهی است که Y_{lm} ویژه تابع π ، L^2 ، L_z می‌باشد.

پس تابع موج کل $\langle r,\theta,\varphi|n,l,m\rangle = \Psi(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$ در رابطه ☆

$\Psi(-\vec{r}) = \pm\Psi(\vec{r})$ می‌گنجد یعنی .

حال به رفتار ویژه تابع انرژی تحت پاریته می‌پردازیم.

ویژه‌کت انرژی

ابتدا یک قضیه را مطرح می‌کنیم

قضیه: فرض کنید $[H,\pi]=0$ باشد و $|n\rangle$ ویژه‌کت غیرتبهگن هامیلتونی

با ویژه مقدار انرژی E_n باشد، یعنی $H|n\rangle = E_n|n\rangle$.

در این صورت $|n\rangle$ ویژه‌کت پاریته هم می‌باشد.

اثبات:

کت حالت $\frac{1}{2}(1\pm\pi)|n\rangle$ را در نظر بگیرید

$$\pi\left[\frac{1}{2}(1\pm\pi)|n\rangle\right] = \frac{1}{2}(\pi\pm\pi^2)|n\rangle = \frac{1}{2}(\pi\pm 1)|n\rangle =$$

$$= \pm\frac{1}{2}(1\pm\pi)|n\rangle = \pm\left[\frac{1}{2}(1\pm\pi)|n\rangle\right]$$

از رابطه فوق معلوم شده است که کت حالت $\frac{1}{2}(1\pm\pi)|n\rangle$ ویژه‌کت π است.

$$H\left[\frac{1}{2}(1\pm\pi)|n\rangle\right] = \frac{1}{2}(H\pm H\pi)|n\rangle = \frac{1}{2}(H\pm\pi H)|n\rangle =$$

$$= E_n\,\frac{1}{2}(1\pm\pi)|n\rangle$$

از رابطه فوق معلوم می‌شود که کت حالت $\frac{1}{2}(1\pm\pi)|n\rangle$ ویژه‌کت هامیلتونی نیز می‌باشد.

با توجه به فرض غیرتبهگن بودن ویژه‌کتهای انرژی در قضیه و با توجه به اینکه $|n\rangle$ و $\frac{1}{2}(1\pm\pi)|n\rangle$ هردو منجر به ویژه مقدار انرژی یکسان E_n می‌شوند باید چنین درنظر گرفت که

$$\frac{1}{2}(1\pm\pi)|n\rangle \propto |n\rangle$$

از آنجاکه برای جمع‌گیری از بروز تبهگنی طبق فرض قضیه باید

$|n\rangle$ و $\frac{1}{2}(1\pm\pi)|n\rangle$ هردو بیانگر یک حالت فیزیکی باشند

پس باید با همدیگر متناسب باشند.

$$\frac{1}{2}(1\pm\pi)|n\rangle \propto |n\rangle$$

چون کت سمت چپ ویژه‌کت پاریته است، پس $|n\rangle$ نیز ویژه‌کت پاریته می‌شود.

مثال: نوسانگر هماهنگ ساده

ویژه توابع نوسانگر هماهنگ ساده، تبهگن نیستند و برای هر $|n\rangle$ مشخص، E_n

مجزا وجود دارد پس در قضیه فوق می‌گنجد

نوسانگر هماهنگ ساده $H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$

$$[\pi, x^2] = 0 \ , \ [\pi, P^2] = 0 \longrightarrow [\pi, H] = 0$$

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle \ , \ n = 0, 1, 2, 3, \ldots \longrightarrow |n\rangle \text{ ها غیرتبهگن}$$

با توجه به وجود شرایط موجود در قضیه، ویژه توابع نوسانگر هماهنگ ساده باید ویژه تابع پاریته نیز باشند.

$$\langle x'|0\rangle = \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{x_0}} e^{-\frac{x'^2}{2x_0^2}} \longrightarrow \text{تحت پاریته زوج}$$

$$\langle x'|1\rangle \propto x' e^{-\frac{x'^2}{2x_0^2}} \longrightarrow \text{تحت پاریته فرد}$$

$$\langle x'|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}\, 2^n\, n!}} \frac{1}{x_0^{n+\frac{1}{2}}} \left(x' - x_0^2 \frac{d}{dx'}\right)^n e^{\frac{-x'^2}{2x_0^2}}$$

$$\langle x'|n\rangle \xrightarrow{\pi} (-1)^n \langle x'|n\rangle$$

پاریته حالت nام $\begin{cases} \text{زوج است، برای } n \text{ زوج} \\ \text{فرد است، برای } n \text{ فرد} \end{cases}$

مثال: اتم هیدروژن $\quad H = \frac{p^2}{2m} + V(r) = \frac{p^2}{2m} - \frac{ke^2}{r}$

می‌دانیم $\quad [\pi, p^2] = 0 \;,\; [\pi, r] = 0 \longrightarrow [H, \pi] = 0$

با وجود آنکه در اتم هیدروژن، شرط $[H,\pi]=0$ برقرار است، ولی ویژه توابع

اتم هیدروژن لزوماً ویژه توابع پاریته نیستند

حالت پایه اتم هیدروژن $\quad n=1 \,,\, l=0 \,,\, m=0 \longrightarrow \underbrace{|1,0,0\rangle}_{\text{غیرتبهگن}} \longrightarrow$ ارسیتال s $\longrightarrow$ تحت پاریته زوج است.

حالت پایه اتم هیدروژن ویژه حالت پاریته است.

حالت برانگیخته $\quad n=2 \begin{cases} l=0 \,,\, m=0 \\ l=1 \,,\, m=0,\pm 1 \end{cases} \longrightarrow$ تبهگن $\longrightarrow$ تابع موج کل ترکیب خطی از ارسیتال s و p است.

$2s$ و $2p$ هرکدام به تنهایی ویژه تابع پاریته هستند اما ترکیب خطی آنها ویژه تابع پاریته نمی‌باشد.

صـ ۲۰

مثال - ذره آزاد $H=\frac{P^2}{2m}$

Since $[\pi, P'] = 0 \longrightarrow [\pi, H] = 0 \longrightarrow$ اما به دلیل وجود تبهگنی برای

دو ویژه کت $|P\rangle$ و $|-P\rangle$ با ویژه مقدار انرژی یکسان $E=\frac{P^2}{2m}$ ، ویژه توابع

$\langle x|P\rangle$ و $\langle x|-P\rangle$ ویژه توابع پاریته نمی‌باشند.

$$\left.\begin{aligned}\langle x|P\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, e^{\frac{ipx}{\hbar}} \rightarrow E=\frac{P^2}{2m}\\ \langle x|-P\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, e^{\frac{-ipx}{\hbar}} \rightarrow E=\frac{P^2}{2m}\end{aligned}\right\}\ \text{تبهگن هستند} \rightarrow \psi(x) \neq \pm\psi(x)$$

* اما می‌توان ترکیب خطی از آنها به صورت $\cos\frac{Px}{\hbar}$ و $\sin\frac{Px}{\hbar}$ ساخت

که هم جواب هامیلتونی باشند و هم ویژه تابع پاریته باشند.

قاعده گزینش پاریته

دو ویژه‌حالت پاریته را به صورت $|\alpha\rangle$ و $|\beta\rangle$ در نظر بگیرید:

$$\pi|\alpha\rangle = \varepsilon_\alpha |\alpha\rangle$$
$$\pi|\beta\rangle = \varepsilon_\beta |\beta\rangle$$

از آنجا که $|\alpha\rangle$ و $|\beta\rangle$ ویژه‌حالتهای پاریته هستند، می‌دانیم $\varepsilon_{\alpha,\beta}=\pm 1$ می‌تواند باشد.

$$\langle\beta|x|\alpha\rangle = \langle\beta|\overbrace{\pi^{+}\pi}^{1}\, x\, \overbrace{\pi^{+}\pi}^{1}|\alpha\rangle$$

$$= \langle\beta|\pi^{+}\cdot \underbrace{\pi x \pi^{+}}_{-x}\cdot \pi|\alpha\rangle = -\varepsilon_\alpha \varepsilon_\beta \langle\beta|x|\alpha\rangle$$

اگر بخواهیم $\langle\beta|x|\alpha\rangle \neq 0$ باشد، لازم است که برای برقراری تساوی

$$\langle\beta|x|\alpha\rangle = -\varepsilon_\alpha \varepsilon_\beta \langle\beta|x|\alpha\rangle$$

داشته باشیم $\varepsilon_\alpha \varepsilon_\beta = -1$.

به عبارت دیگر، $\varepsilon_\alpha = -\varepsilon_\beta$

یعنی x که دارای پاریته فرد است، حالتهای با پاریته مخالف را به هم وصل می‌کند.

یعنی برای غیرصفر شدن عبارت $\langle\beta|x|\alpha\rangle$، $|\alpha\rangle$ و $|\beta\rangle$ باید دارای پاریته مخالف هم باشند.

همچنین اگر $[H, \pi]=0$ باشد، آنگاه ویژه‌حالتهای غیرتبهگن
نمی‌توانند گشتاور دوقطبی الکتریکی دائم داشته باشند.

$$\langle n|x|n\rangle = \langle n|\pi^{+}\pi \; x \; \pi^{+}\pi|n\rangle = \langle n|\pi^{+}(-x)\pi|n\rangle$$

$$= -\langle n|\pi^{+}x\pi|n\rangle$$

$$\langle n|x|n\rangle = -\langle n|x|n\rangle$$

$$\Downarrow$$

$$\langle n|x|n\rangle = 0$$

پس گشتاور دوقطبی الکتریکی دائم وجود ندارد.

امّا، حالتهای تبهگن می‌توانند گشتاور دوقطبی الکتریکی ایجاد کنند.