به نام خدا

حل معادله هامیلتون - ژاکوبی تعمیم یافته تحت قید معادله پیوستگی

معادله هامیلتون-ژاکوبی

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H = 0$$

معادله پیوستگی

$$\frac{\partial R^2}{\partial t} + \nabla.\left(R^2 \frac{\nabla S}{m}\right) = 0$$

برای پتانسیل های مرکزی داریم:

$$H(r,\theta,\phi,p_r,p_\theta,p_\phi) = \frac{1}{2m}\left[p_r^2 + \frac{p_\theta^2}{r^2} + \frac{p_\phi^2}{r^2 \sin^2\theta}\right] + V(r) + Q(r,\theta,\phi)$$

بواسطه تقارن کروی پتانسیل V، R را به صورت:

$$R(r,\theta,\phi) = R_r(r)R_\theta(\theta)R_\phi(\phi)$$

در نظر می گیریم که با این کار پتانسیل کوانتومی به شکل زیر در می آید:

$$\boxed{Q(r,\theta,\phi) = \left[Q_r(r) + \frac{Q_\theta(\theta)}{r^2} + \frac{Q_\phi(\phi)}{r^2\, sin^2\theta}\right]}$$

به جای حل مستقیم معادله هاملتون-ژاکوبی، معادلات کانونیک نظیر را تشکیل داده و حل می کنیم.

قبل از ادامه بحث لمی از نظریه هامیلتون-ژاکوبی کلاسیک را یادآوری می کنیم

هرگاه پتانسیل کلاسیک به شکل:

$$V(r,\theta,\phi) = \left[V_r(r) + \frac{V_\theta(\theta)}{r^2} + \frac{V_\phi(\phi)}{r^2 \sin^2\theta}\right]$$

باشد آنگاه تابع اصلی هامیلتون کاملا جدایی پذیر بوده و به شکل زیر در می آید:

$$S(r,\theta,\phi) = W_r(r) + W_\theta(\theta) + W_\phi(\phi) - Et$$

بنابراین (در حالت پایا) معادلات کانونیک و معادله پیوستگی به صورت زیر می باشند:

$$p_\phi^2 + 2mQ_\phi(\phi) = \alpha_\phi^2$$

$$p_\theta^2 + \frac{\alpha_\phi^2}{sin^2\theta} + 2mQ_\theta(\theta) = \alpha_\theta^2$$

$$H = \frac{1}{2m}\left(p_r^2 + \frac{\alpha_\theta^2}{r^2}\right) + V(r) + Q_r(r) = E$$

$$\nabla.\left(R^2\frac{\nabla S}{m}\right) = 0$$

معادله پیوستگی

و یا

$$\frac{R_r}{\hbar^2}p_r^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}R_r\right) + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - V(r) - \frac{\alpha_\theta^2}{2mr^2}\right)R_r \qquad (1)$$

$$\frac{R_\theta}{\hbar^2}p_\theta^2 = \frac{1}{sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}R_\theta\right) + \left(\alpha_\theta^2 - \frac{\alpha_\phi^2}{sin^2\theta}\right)\frac{R_\theta}{\hbar^2} \qquad (2)$$

$$\frac{R_\phi}{\hbar^2}p_\phi^2 = \frac{\partial^2}{\partial\phi^2}R_\phi + \frac{\alpha_\phi^2}{\hbar^2}R_\phi \qquad (3)$$

$$0 = f_r + f_\theta + \frac{f_\phi}{sin^2\theta} \qquad (4)$$

معادله پیوستگی

که

$$f_r(r) = \frac{1}{R_r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 R_r^2 \frac{\partial W_r}{\partial r}\right) \tag{5}$$

$$f_\theta(\theta) = \frac{1}{R_\theta^2}\frac{1}{sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta R_\theta^2 \frac{\partial W_\theta}{\partial\theta}\right) \tag{6}$$

$$f_\phi(\phi) = \frac{1}{R_\phi^2}\frac{\partial}{\partial\phi}\left(R_\phi^2 \frac{\partial W_\phi}{\partial\phi}\right). \tag{7}$$

بواسطه شرط پیوستگی دو کمیت p_r و p_θ صفر شده و معادله (1) به معادله شعاعی شرودینگر تقلیل می یابد.

حال قصد داریم p_φ، α_φ،α_θ، R_φ و R_θ را بدست آوریم.

استدلال صفر شدن p_r و p_θ:

به جهت برقراری معادله پیوستگی(4) باید داشته باشیم:

$$f_\phi(\phi) = c_\phi \tag{8}$$

$$f_\theta(\theta) + \frac{c_\phi}{\sin^2\theta} = c_\theta \tag{9}$$

$$f_r(r) = -c_\theta \tag{10}$$

(5)

(10)

$$\Rightarrow \left(r^2 R_r^2 \frac{\partial W_r}{\partial r}\right)_{r_{Max}} - \left(r^2 R_r^2 \frac{\partial W_r}{\partial r}\right)_{r_{Min}} = -c_\theta \int_{r_{Min}}^{r_{Max}} R_r^2 \, dr$$

$$p_r = \partial W_r / \partial r \longrightarrow p_r = 0 \qquad , r = r_{min}, r = r_{max}$$

$$\Downarrow$$

$$c_\theta = 0 \longrightarrow \dot{r} = 0$$

به همین طریق می توان استدلال کرد که c_φ نیز باید صفر باشد و بنابراین $\dot{\theta} = 0$ است.

بنابراین p_r و p_θ صفر می شوند

اما در مورد p_φ

$$R_\varphi^2 P_\varphi = \lambda_\varphi$$

$$P_\varphi^2 - \frac{\hbar^2}{R_\varphi}\frac{\partial^2 R_\varphi}{\partial \varphi^2} = \alpha_\varphi^2$$

$$\hbar^2 \frac{\partial^2 R_\varphi}{\partial \varphi^2} + \alpha_\varphi^2 R_\varphi = \frac{\lambda_\varphi^2}{R_\varphi^3} \quad \text{(Ermakov equation)}$$

که دارای حلی به این صورت می باشد:

$$R_\varphi^2 = \frac{1}{2\pi}\left(1 + \sqrt{1 - \left(\frac{2\pi\lambda_\varphi}{\alpha_\varphi}\right)^2} \sin 2\frac{\alpha_\varphi}{\hbar}\varphi\right)$$

در نتیجه λ_φ یک پارامتر آزاد در R_φ است. سپس P_φ و W_φ را بدست می آوریم:

$$P_\varphi = \frac{2\pi\lambda_\varphi}{1 + \sqrt{1 - \left(\frac{2\pi\lambda_\varphi}{\alpha_\varphi}\right)^2} \sin 2\frac{\alpha_\varphi}{\hbar}\varphi}$$

$$R_\varphi^2(\varphi) = R_\varphi^2(\varphi + 2\pi)$$

(شرط دوره ای بودن)

$$\frac{2\alpha_\varphi}{\hbar} = integer$$

$$\begin{cases} if \quad \lambda_\varphi \neq 0 \longrightarrow \alpha_\varphi = m\frac{\hbar}{2} \\ if \quad \lambda_\varphi = 0 \longrightarrow \alpha_\varphi = m\hbar \end{cases}$$

$$\left(\alpha_\varphi^2 R_\varphi^2 = A\sin^2\left[\left(\frac{\alpha_\varphi}{\hbar}\right)\varphi + \frac{\pi}{4}\right]\right)$$

که:

$$-\frac{|\alpha_\varphi|}{2\pi} \leq \lambda_\varphi \leq \frac{|\alpha_\varphi|}{2\pi}$$

mعدد صحیح غیر صفر

$$W_{\varphi} = \sin\left(\frac{2\pi\lambda_{\varphi}}{\alpha_{\varphi}}\right)\hbar \tan^{-1}\left[\frac{\sqrt{1-\left(\frac{2\pi\lambda_{\varphi}}{\alpha_{\varphi}}\right)^{2}+\tan\left(2\frac{\alpha_{\varphi}}{\hbar}\varphi\right)}}{\left|\frac{2\pi\lambda_{\varphi}}{\alpha_{\varphi}}\right|}\right] \qquad if \quad \lambda_{\varphi} \neq 0$$

$$W_{\varphi} = \text{const} \qquad if \quad \lambda_{\varphi} = 0$$

به طور خلاصه:

$$if \quad \lambda_{\varphi} = 0 \longrightarrow \frac{\alpha_{\varphi}}{\hbar} = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$$

$$if \quad \lambda_{\varphi} \neq 0 \longrightarrow \frac{\alpha_{\varphi}}{\hbar} = \pm\frac{1}{2}, \pm 1, \pm\frac{3}{2}, \pm 2, \ldots$$

تا اینجا P_r ، P_θ، P_φ ، α_φ و R_φ مشخص شد. با مشخص شدن α_φ می توان α_θ را تعیین کرد.

الف- اگر $\alpha_\varphi = m\hbar$ باشد به کمک معادله $p_\theta^2 + \frac{\alpha_\phi^2}{\sin^2\theta} + 2mQ_\theta(\theta) = \alpha_\theta^2$ **در می یابیم که:**

$$\alpha_\theta^2 = l(l+1)\hbar^2$$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$$

$$l = nonzero\ integer$$

ب- اگر $\alpha_\varphi = m\hbar/2$ باشد:

$$\alpha_\theta^2 = J(J+1)\hbar^2$$

و R_θ بدست می آید.

$$z = (1+x)^{(n-\lambda)/2}(1-x)^{(n-\mu)/2}\frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}}\left[(1+x)^{\lambda}(1-x)^{\mu}\right]$$

$$n = \frac{1}{2}[1 \pm |m| \pm |m| \pm (2J + 1)]$$

$$\lambda = -\frac{1}{2}[1 \pm |m| \mp |m| \mp (2J + 1)]$$

$$\mu = -\frac{1}{2}[1 \mp |\mathrm{m}| \pm |\mathrm{m}| \mp (2\mathrm{J} + 1)]$$

$$y = z(1 - x^2)^{-1/2}$$

$$y = R_\theta$$

$$x = \cos\theta$$

نتیجه گیری

- مقادیر نیمه صحیح تکانه زاویه ای در روشی مشابه مقادیر صحیح بدست می آیند و بواسطه اعمال شرط پیوستگی مقادیر گسسته دارند.

- برای مقادیر نیمه صحیح جواب های انتگرال پذیر مجذوری داریم.

- در این رهیافت مبتنی بر مسیر مساله در مکانیک کوانتومی را به عنوان انحرافی از مکانیک کلاسیک بررسی کرده، بدون نیاز به مفهوم تابع موج، معادله شرودینگر، اپراتور هرمیتی، ویژه مقادیر اپراتور هرمیتی و... نتایج را بدست آورده ایم.

با سپاس