به نام خدا

گزارش پروژه‌ی مکانیک کوانتومی ۲

ذره در چاه پتانسیل کروی

اعضای گروه:

محمود حسنی ۴۰۲۴۱۶۰۱۸

عادل زارع طزرقی ۴۰۲۴۱۶۰۳۲

آذین شیرمحمدی ۴۰۲۴۱۶۰۳۸

استاد مربوطه: دکتر سیامک سادات گوشه

تیرماه ۱۴۰۳

هامیلتونی این مسئله را می توان به صورت زیر نوشت

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(r) \tag{1}$$

همان گونه که از مسئله مشخص است $V(r)$ تابعیتی از r دارد که در کتاب هم به مسائلی که این گونه هستند (spherically symmetric) می گویند.

در فیزیک کلاسیک تکانه ی زاویه ای در این گونه مسائل پایسته است اما چنین چیزی در مکانیک کوانتومی هم تقریباً به طور مشابه بیان می شود.

اگر داشته باشیم:

$$[L, P^2] = [L, P]P - P[L, P] \tag{2}$$

$$[L, P] = [x \times P, P] = [yP_z - zP_y, P_x]\hat{\imath} - [xP_z - zP_x, P_y]\hat{\jmath} + [xP_y - yP_x, P_z]\hat{k} = 0$$

پس نتیجه می گیریم:

$$[L, P^2] = 0 \tag{3}$$

به طور مشابه می توان گفت:

$$[\vec{L}, \vec{r}] = 0 \Rightarrow [\vec{L}, \vec{x}^2] = 0 \qquad * \vec{r} = \vec{x} \tag{4}$$

در نتیجه :

$$[\vec{L}, \vec{H}] = 0 \tag{5}$$

از معادله ی بالا این نتیجه برداشت می شود که L و H ویژه بردار های هم زمان دارند.

$$H|Elm >= E|Elm > \tag{6}$$

$$L^2|Elm >= l(l+1)\hbar|Elm > \tag{7}$$

$$L_z|Elm >= m\hbar|Elm > \tag{8}$$

از معادله ی (۲-۲۳۰) کتاب داریم:

$$\frac{1}{2m}\langle\vec{x}|\vec{P}|\alpha\rangle = \frac{-\hbar}{2m}\nabla^2\langle\vec{x}|a\rangle = \frac{-\hbar}{2m}(\frac{\partial^2}{\partial r^2}\langle\vec{x}|a\rangle + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\langle\vec{x}|\alpha\rangle - \frac{1}{\hbar^2 r^2}\langle\vec{x}|L^2|\alpha\rangle) \tag{9}$$

حال اگر:

$$|a >= m|Elm >\Rightarrow \langle\vec{X}|a\rangle = \langle\vec{X}|Elm\rangle = R(r)Y_l^m(\theta, \varphi) \tag{10}$$

پس:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right)+\frac{l(l+1)\,\hbar^2}{2mr^2}+v(r)\right]R_{El}(r)=ER_{El}(r) \tag{11}$$

حال اگر REl را به‌صورت زیر تعریف کنیم:

$$R_{El}(r)=\frac{u_{El}(r)}{r} \tag{12}$$

می توان نوشت:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u_{EL}(r)}{dr^2}+\left[\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}+V(r)\right]u_{El}(r)=Eu_{El}(r) \tag{13}$$

پس کافی است این مسله را به صورت عددی حل نماییم.

برای $r<a$ داریم:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u_{EL}(r)}{dr^2}+\left[\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}-V_0\right]u_{El}(r)=Eu_{El}(r) \tag{14}$$

و برای $r\geq a$ داریم:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u_{EL}(r)}{dr^2}+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}u_{El}(r)=Eu_{El}(r) \tag{15}$$

معادله ی بالا یک معادله ی شعاعی است و ما قصد داریم با این معادله کار کنیم.

$V(r)$ برای ($r<a$) برابر $-V_0$ و برای ($r\geq a$) برابر صفر است.

برای داخل پوسته معادله به صورت زیر است:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u_{EL}(r)}{dr^2}+\left[\frac{l(l+1)}{2mr^2}-V_0\right]u_{El}(r)=Eu_{El}(r) \tag{16}$$

$$\frac{d^2}{dr^2}u_{El}(r)=\frac{2m}{\hbar^2}\left[\frac{l(l+1)}{2mr^2}-V_0-E\right]u_{El}(r) \tag{17}$$

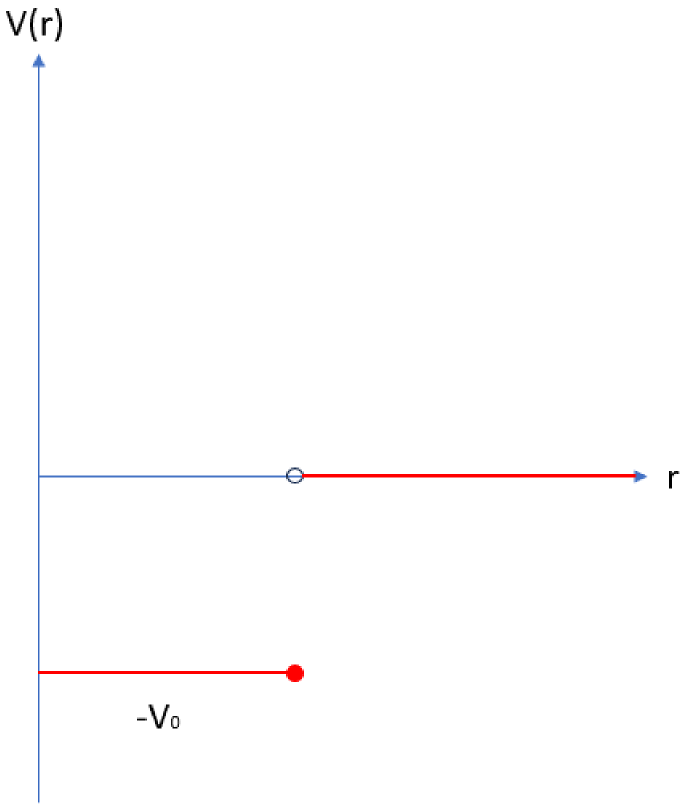
$$\left[-\frac{d^2}{dr^2}+\frac{l(l+1)}{r^2}\right]u_{El}(r)=\frac{2m}{\hbar^2}[E+V_0]u_{El}(r) \tag{18}$$

$$a^2 = \frac{2m}{\hbar^2}[E + V_0] \qquad (19)$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \qquad (20)$$

اگر$(|E| < |V_0|)$ در حالت مقید قرار داریم.

شکل:



در نتیجه برای $(0 \leq r < a)$ داریم:

$$\frac{1}{r}u_{El}(r) = AJ_l(\alpha r) \qquad (21)$$

و برای $(a < r)$ داریم:

$$\frac{1}{r}u_{El(r)} = Bh_l^{(1)}(kr) \qquad * \; k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \qquad (22)$$

برای $l = 0$

و $r < a$ داریم:

$$\frac{d^2}{dr^2}u(r) = -\frac{2m}{\hbar^2}(E + V_0)u(r) = -k_0^2 u(r) \qquad (23)$$

و در حالت $r > a$:

$$\frac{d^2}{dr^2}u(r) = -\frac{2m}{\hbar^2}Eu(r) = q^2 u(r) \qquad (24)$$

پس نتیجه می گیریم که :

$$E + V_0 = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} \qquad (25)$$

$$E = -\frac{\hbar^2 q^2}{2m} \qquad (26)$$

در نتیجه می توان گفت :

$$(k_0 a)^2 + (qa)^2 = \frac{2m}{\hbar^2}V_0 a^2 \qquad (27)$$

جواب های $u(r)$ عبارت اند از:

$$u(r) = A\,sin(k_0 r) \qquad *\,(r < a) \qquad (28)$$

$$u(r) = c\,exp(-qr) \qquad *\,(r > a) \qquad (29)$$

از شرایط مرزی می توان گفت که معادله در $r = a$ پیوستگی دارد، پس برای $u(r)$ و $u'(r)$ داریم:

$$u(r)\colon A\,sin(k_0 a) = Ce^{-qa} \qquad (30)$$

$$u'(r)\colon Ak_0\,cos(k_0 a) = C(-q)e^{-qa} \qquad (31)$$

اگر دو معادله ی بالا را به هم تقسیم کرده و طرفین معادله را در a ضرب و تقسیم کنیم، می توان نتیجه گرفت:

$$\tan(k_0 a) = -\frac{ak_0}{aq} \qquad (32)$$

تغییر متغییر می دهیم:

$$k_0 = \frac{z}{a} \tag{33}$$

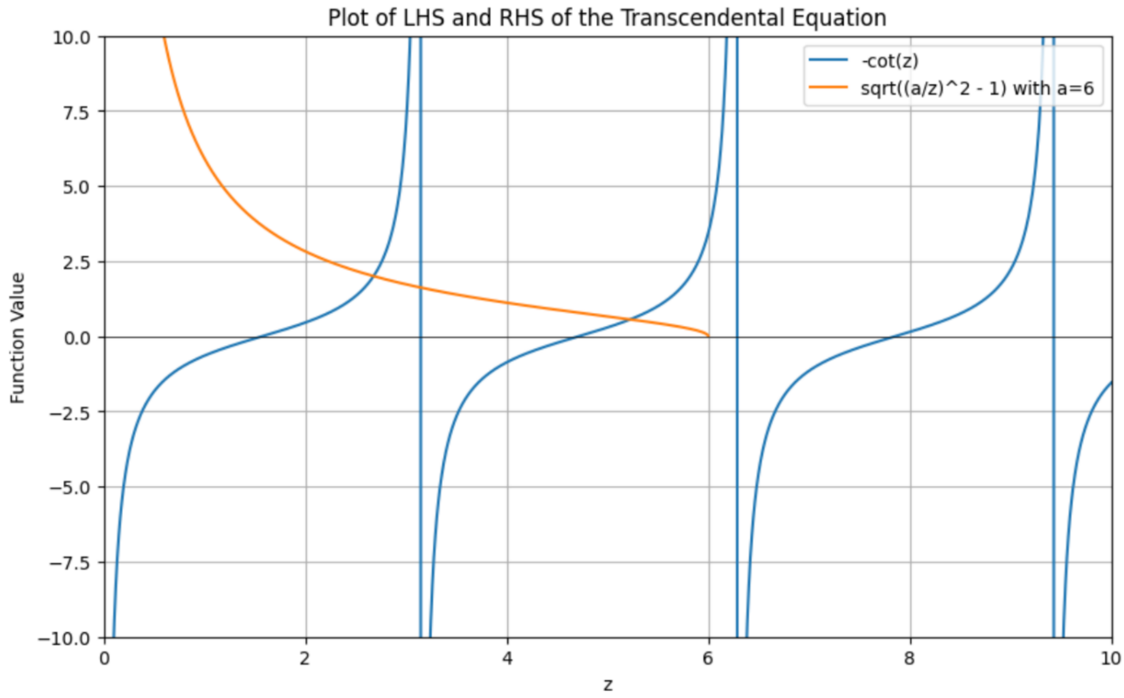
$$k_0 a = z \tag{34}$$

بنابراین می توان نوشت:

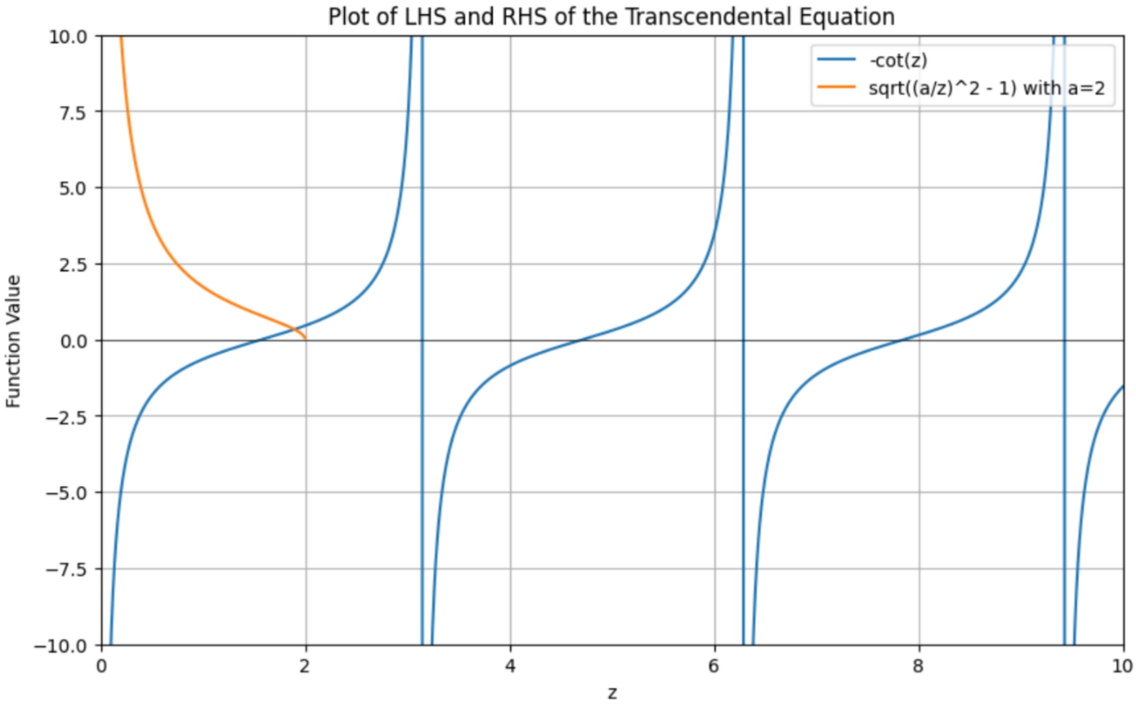
$$\tan(z) = -\frac{z}{aq} \tag{35}$$

$$q^2 = -\frac{2m}{\hbar^2}E = \frac{2m}{\hbar^2}V_0 - {k_0}^2 \tag{36}$$

$$\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} < z_0 \rightarrow \tan(z) = \frac{-1}{\sqrt{\frac{z_0^2}{z^2} - 1}} \tag{37}$$



شکل۱: نمودار مربوط به رابطه ۳۷، با عمق چاه = ۶



شکل۱: نمودار مربوط به رابطه ۳۷، با عمق چاه = ۲

برای lهای بزرگ تر از صفر داریم:

$$\frac{d^2}{dr^2}u(r)-\frac{l(l+1)}{r^2}u(r)+\frac{2m}{\hbar^2}(E+V_0)u(r)=0 \qquad *\,(r<a) \tag{38}$$

یا می توان نوشت:

$$\frac{d^2}{dr^2}u(r)+\left[k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]u(r)=0 \tag{39}$$

که k عدد موج، به صورت زیر تعریف می شود:

$$E+V_0=\frac{\hbar^2}{2m}k^2 \tag{40}$$

حال ما کمیت بدون بعد (ρ) را به صورت زیر تعریف می کنم:

$$\rho=kr \tag{41}$$

در نتیجه داریم:

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}+1\right]u_{kl}(\rho)=0 \tag{42}$$

جواب های این معادله ی دیفرانسیل به صورت زیر است:

$$u_{kl}(\rho) = A_1 \rho j_l(\rho) + A_2 \rho n_l(\rho) \tag{43}$$

میدانیم که توابع بسل و نویمن کروی به صورت زیر تعریف می شود:

$$j_l(\rho) = (-\rho)^l \left[\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right]^l \left(\frac{\sin\rho}{\rho}\right)$$
$$n_l(\rho) = -(-\rho)^l \left[\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right]^l \left(\frac{\cos\rho}{\rho}\right) \tag{44}$$

اگر ρ را به سمت صفر میل دهیم توابع نویمن به بی نهایت میل می کنند پس ضریب این تابع را برابر صفر میگیریم $A_2 = 0$ پس داریم:

$$R_{kl}(\rho) = A_l j_l(kr) \tag{45}$$

که $rR_{kl}(r) = u_{kl}(r)$ و A_l یک ثابت است.

$$u(\rho) \propto \sqrt{\rho} J_{l+\frac{1}{2}}(\rho) = \rho \frac{J_{l+\frac{1}{2}}(\rho)}{\sqrt{\rho}} = \sqrt{\frac{2}{\Pi}} \rho j_l(\rho) \tag{46}$$

$$R(r) = \frac{u(r)}{r} \propto \frac{u(\rho)}{\rho} = j_l(\rho) \tag{47}$$

حال معادله ی دیفرانسیلی را برای $(r > a)$ حل می کنیم.

$$\frac{d^2}{dr^2}u(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}u(r) + \frac{2m}{\hbar^2}Eu(r) = 0 \qquad * (r > a) \tag{48}$$

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m}\kappa^2 \tag{49}$$

که در این جا κ عدد موج است.

$$\frac{d^2}{dr^2}u(r) + \left[(i\kappa)^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]u(r) = 0 \tag{50}$$

حال ما کمیت بدون بعد (ρ) را به صورت زیر تعریف می کنم:

$$\rho = i\kappa r \tag{51}$$

در این صورت

$$\frac{d^2}{d\rho^2}u_{kl}(\rho) + \left[1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]u_{kl}(\rho) = 0 \tag{52}$$

جواب های حل این معادله ی دیفرانسیلی به صورت زیر است:

$$R_{kl}(r) = B'_1 j_l(i\kappa r) + B'_2 n_l(i\kappa r) = B_1 h_l^{(1)}(i\kappa r) + B_2 h_l^{(2)}(i\kappa r) \tag{53}$$

در این جا $h_l^{(1)}$ و $h_l^{(2)}$ توابع اول و دوم هنکل کروی هستند.

$$h_l^{(1)}(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}}H_{l+\frac{1}{2}}^{(1)}(x) = j_l(x) + in_l(x) \tag{54}$$

$$h_l^{(2)}(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}}H_{l+\frac{1}{2}}^{(2)}(x) = j_l(x) - in_l(x) \tag{55}$$

این روابط در مقدار های مجانبی تقریبا برابر:

$$h_l^{(1)}(x) \approx -i\frac{e^{i\left(x-\frac{l\Pi}{2}\right)}}{x} \tag{56}$$

$$h_l^{(2)}(x) \approx i\frac{e^{-i\left(x-\frac{l\Pi}{2}\right)}}{x} \tag{57}$$

در حدود x های بزرگ داریم:

$$h_l^{(1)}(i\kappa r) \approx -i\frac{e^{i\left(i\kappa r-\frac{l\Pi}{2}\right)}}{i\kappa r} = -\frac{e^{i\left(-\kappa r-i\frac{l\Pi}{2}\right)}}{\kappa r} \tag{58}$$

$$h_l^{(2)}(i\kappa r) \approx i\frac{e^{-i\left(i\kappa r-\frac{l\Pi}{2}\right)}}{i\kappa r} = \frac{e^{\left(\kappa r+i\frac{l\Pi}{2}\right)}}{\kappa r} \tag{59}$$

نتیجه می گیریم که برای r های بزرگ $h_l^{(2)}$ به بی نهایت میل می کند و $h_l^{(1)}(i\kappa r)$ صفر می شود پس ما تابع $h_l^{(1)}(i\kappa r)$ را برای جواب $R_{kl}(r)$ در $(r > a)$ انتخاب می کنیم: $R_{k_l}(r) = B_1 h_l^{(1)}(i\kappa r)$ که B_1 ثابت است.

با اعمال شرایط مرزی در a خواهیم داشت:

$$A_l j_l(ka) = B_1 h_l^{(1)}(i\kappa a) \tag{60}$$

$$A_l k j'_l(ka) = B_1 i\kappa h_l^{(1)\prime}(i\kappa a) \tag{61}$$

پس می‌توان دو رابطه‌ی فوق را به هم تقسیم کنیم:

$$ka\frac{1}{j_l(x)}\frac{\partial j_l(x)}{\partial x}\bigg|_{x=ka} = i\kappa a\frac{1}{h_l^{(1)}(x)}\frac{\partial h_l^{(1)}(x)}{\partial x}\bigg|_{x=i\kappa a} \tag{62}$$

با تغییر متغییر داریم:

$$\xi = ka \qquad \eta = \kappa a \tag{63}$$

با توجه به روابط زیر:

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m}\kappa^2 \quad \text{و} \quad E + V_0 = \frac{\hbar^2}{2m}\kappa^2 \tag{64}$$

شرایط نرمالیزاسیون:

$$1 = \int_0^a \frac{A^2\sin^2(k_0 r)}{r^2}4\pi r^2 dr + \int_a^\infty \frac{C^2\exp(-2qr)}{r^2}4\pi r^2 dr\,,$$

or

$$\int_0^a \frac{A^2\sin^2(k_0 r)}{r^2}4\pi r^2 dr = 4\pi A^2\int_0^a \sin^2(k_0 r)dr$$
$$= 4\pi A^2 a[\frac{2\alpha - \sin(2\alpha)}{4\alpha}]$$

$$\int_a^\infty \frac{C^2\exp(-2qr)}{r^2}4\pi r^2 dr = 4\pi C^2\int_a^\infty \exp(-2qr)dr$$
$$= 4\pi C^2\frac{e^{-2\beta}}{2\beta}$$

or

$$1 = 4\pi A^2 a\left[\frac{2\alpha - \sin(2\alpha)}{4\alpha}\right] + 4\pi C^2 a\left(\frac{e^{-2\beta}}{2\beta}\right),$$

$$A\sin(\alpha) = C\exp(-\beta)\,,$$

$$A\sqrt{a} = \frac{\sqrt{\alpha\beta}}{\sqrt{\pi}\sqrt{-2\beta\sin\alpha\cos\alpha + 2\alpha(\beta + \sin^2\alpha)}}\,,$$

$$C\sqrt{a} = \frac{e^{\beta}\sqrt{\alpha\beta}\sin\alpha}{\sqrt{\pi}\sqrt{-2\beta\sin\alpha\cos\alpha + 2\alpha(\beta + \sin^2\alpha)}}\,.$$

می توان نوشت:

$$(ka)^2 + (\kappa a)^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} a^2 = r_0^2 \tag{65}$$

با جا گزاری ξ و η در رابطه ی بالا معادله ی زیر نتیجه می شود:

$$\xi^2 + \eta^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} a^2 = r_0^2 \tag{66}$$

از شرط پیوستگی می دانیم که تابع در *r=a* و مشتق آن در این نقطه برای $(r > a)$ و $(r < a)$ با هم برابراند.

$$i\kappa a \frac{1}{h_l^{(1)}(x)} \frac{\partial h_l^{(1)}(x)}{\partial x}\bigg|_{x=i\kappa a} = \frac{x}{h_l^{(1)}(x)} \frac{\partial h_l^{(1)}(x)}{\partial x}\bigg|_{x=i\kappa a} \tag{67}$$

$$= \frac{iy}{h_l^{(1)}(iy)} \frac{\partial h_l^{(1)}(iy)}{\partial (iy)}\bigg|_{y=\kappa a} = \frac{y}{h_l^{(1)}(iy)} \frac{\partial h_l^{(1)}(iy)}{\partial y}\bigg|_{y=\kappa a} \tag{68}$$

در نتیجه جواب های مساله با رسم نمودار با استفاده از معادله ی $\left(\xi^2 + \eta^2 = \frac{2nV_0}{\hbar^2} a^2 = r_0^2\right)$ به دست می آید (r_0 شعاع به عنوان یک پارامتر متغییر است).

چاه کروی محدود در $l = 1$

میدانیم که:

$$ka \frac{1}{j_l(x)} \frac{\partial j_l(x)}{\partial x}\bigg|_{x=ka} = i\kappa a \frac{1}{h_l^{(1)}(x)} \frac{\partial h_l^{(1)}(x)}{\partial x}\bigg|_{x=i\kappa a} \tag{69}$$

پس برای l =1 می توان نوشت:

$$\frac{\cot \xi}{\xi} - \frac{1}{\xi^2} = \frac{1}{\eta} + \frac{1}{\eta^2} \tag{70}$$

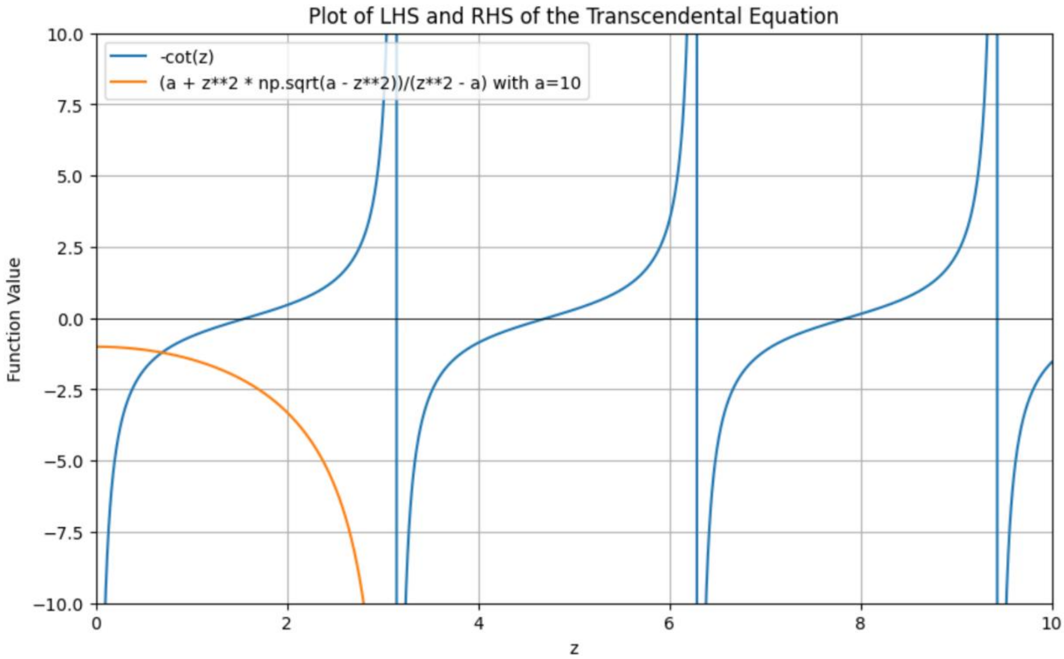
که با کمی تغییر معادله ی بالا به صورت زیر در می آید:

$$\eta^2 \xi \cos \xi = [\xi^2(1+\eta) + \eta^2] \sin \xi \tag{71}$$

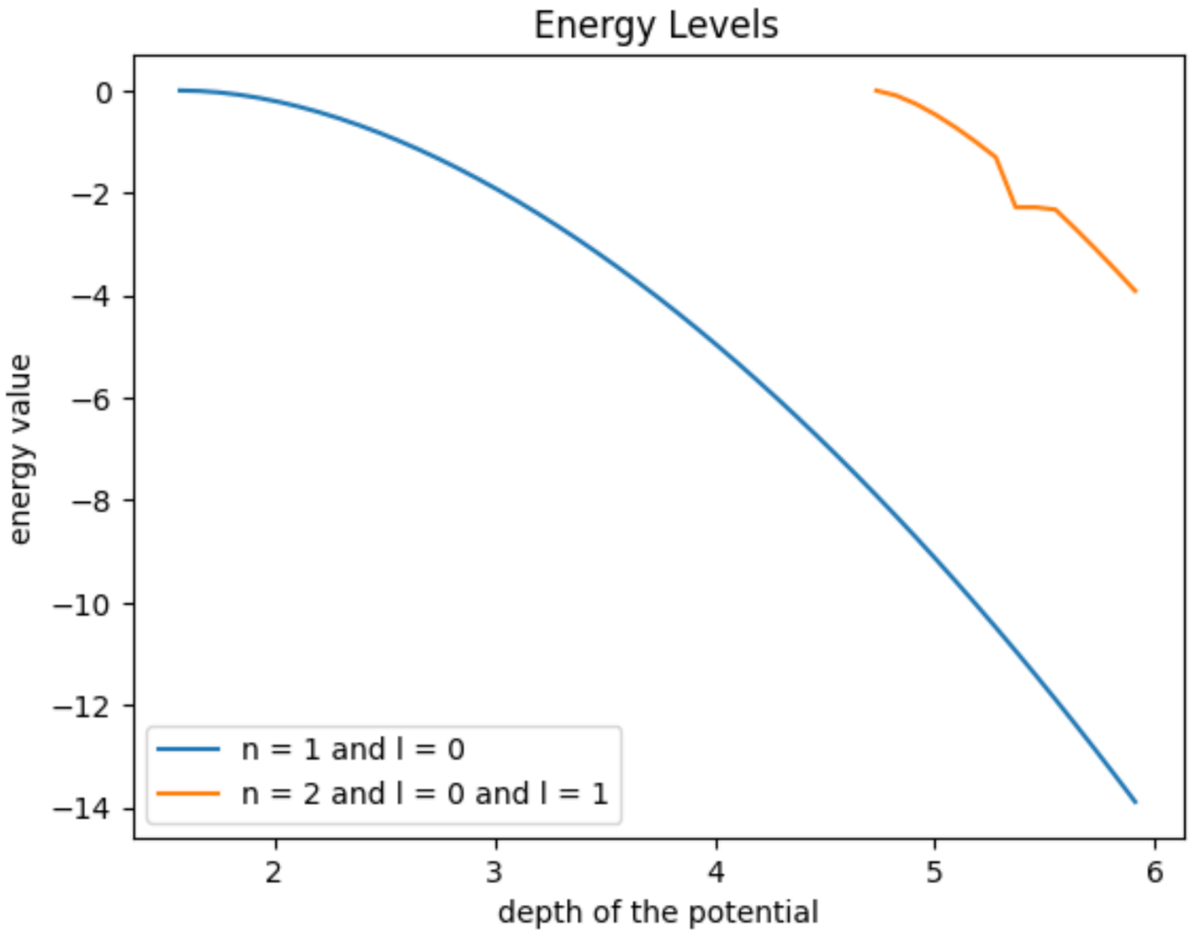
معادله ی بالا همراه با معادله ی زیر:

$$\xi^2 + \eta^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} a^2 = r_0^2 \tag{72}$$

که در آن $\eta = \kappa a$ و $\xi = ka$

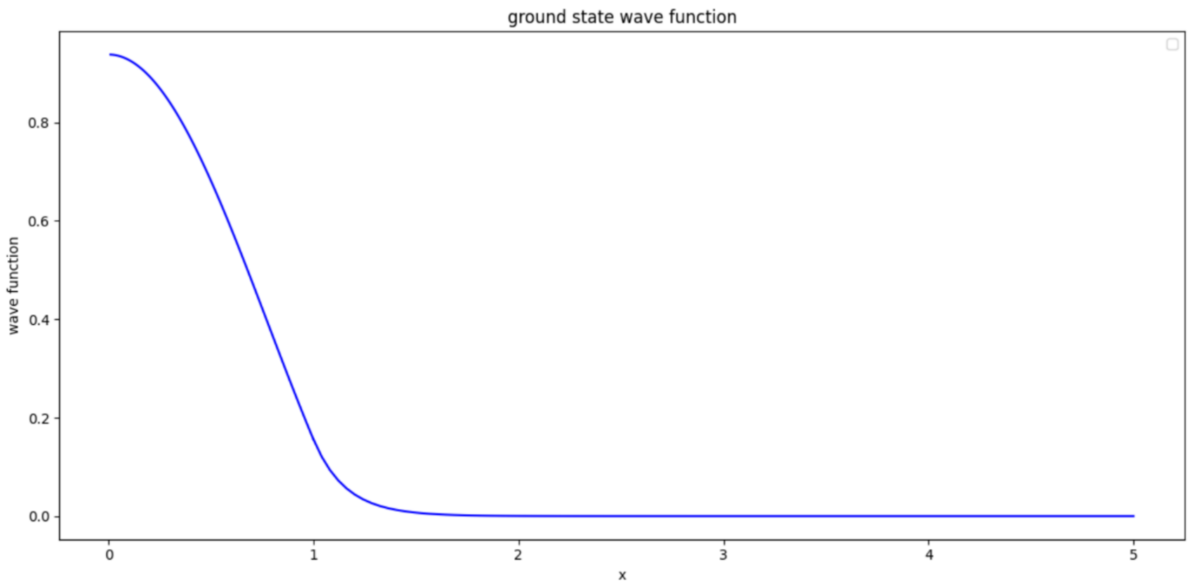


شکل ۳: نمودار مربوط به رابطه‌ی ۷۲

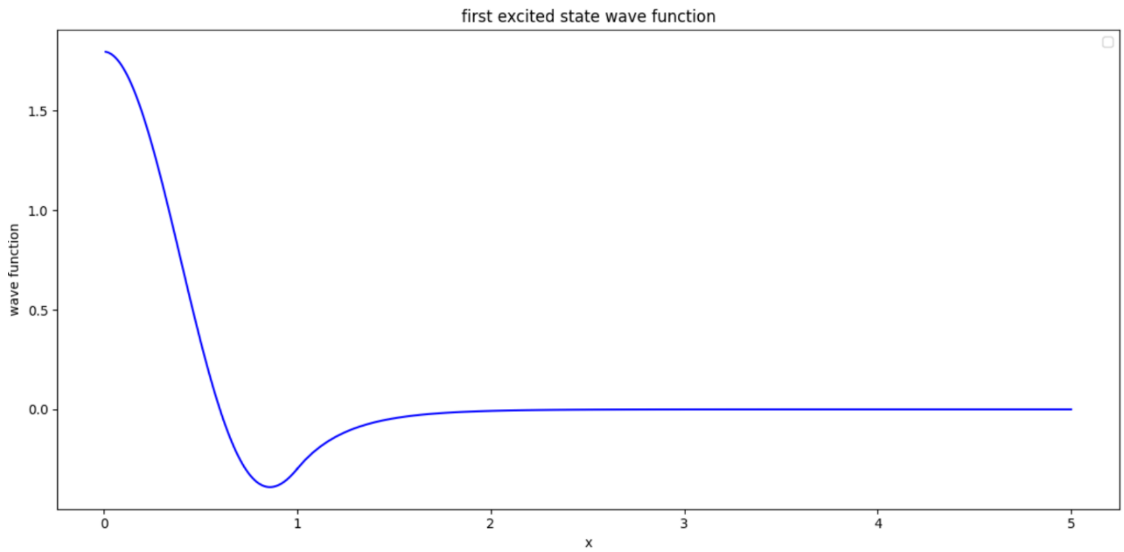


شکل۴: نمودار سطوح انرژی

حائز اهمیت است که بگوییم برای حالت $n = 2$ در قسمتی از نمودار انرژی $l = 1$ کمتر از انرژی $l = 0$ میشود



شکل۵: نمودار تابع موج برای حالت پایه برای $l = 0$



شکل۶: نمودار تابع موج برای اولین حالت برانگیخته برای $l = 0$

در حالتی که $|E| > 0$ است حالت پراکندگی را خواهیم داشت:

مطابق با آنچه که پیش از این دیدیم، برای بخش شعاعی خواهیم داشت:

در صورتی که $r < a$:

$$R_\ell = Aj_\ell(k'r) \tag{73}$$

$$k'^2 = \frac{2m}{\hbar^2}[E + V_0] \tag{74}$$

و در حالتی که $r > a$ است و پتانسیل صفر است خواهیم داشت:

$$R(r) = Bh_l^1(kr) + Ch_l^2(kr) \tag{75}$$

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E \tag{76}$$

نکته‌ی حائز اهمیت ان است که توابع نویمن برای rهای نزدیک صفر، صفر میشوند. از این رو حالت $r < a$ تابع نویمن را نداریم.

با رعایت شرط پیوستگی تابع در a و مشتق اول تابع در a، خواهیم داشت:

پیوستگی تابع موج: $AJ_l(k'a) = Bh_l^{(1)}(ka) + Ch_l^{(2)}(ka)$

پیوستگی مشتقات: $k'AJ'_l(k'a) = kBh'^{(1)}_l(ka) + kCh'^{(2)}_l(ka)$

از شرایط نرمالیزاسیون داریم:

$$\int_0^a (Aj_l(kx))^2 dx + \int_a^\infty (Bh_l^{(1)}(k'a) + Ch_l^{(2)}(k'a)\ )^2 = 1$$

در اینجا چهار مجهول و سه معادله داریم که در نتیجه نمی توانیم مقدار انرژی را به صورت دقیق مشخص کنیم