(۲۰۵)

پاسخ سری ششم تمرینات مکانیک کوانتومی پیشرفته ۲

(۱ نمره)

پاسخ سوال اول

جداسازی متغیرها در حل معادلات دیفرانسیل زیر که به معادله هلمهولتز موسوم است، ممکن است مفید باشد:

$$\nabla^2 \psi + k^2 \psi = 0$$

اما جداسازی متغیرها فقط در ۱۱ مختصات من جمله مختصات قائم (دکارتی)، استوانه‌ای و کروی تحت شرایط خاص به $k^2$ امکان پذیر می‌باشد. به عنوان مثال در صورت برقرا بودن:

در دستگاه دکارتی $\quad k^2 \to f(x) + g(y) + h(z)$

در دستگاه استوانه‌ای $\quad k^2 \to f(\rho) + \dfrac{g(\varphi)}{\rho^2} + h(z)$

در دستگاه کروی $\quad k^2 \to f(r) + \dfrac{g(\theta)}{r^2} + \dfrac{h(\varphi)}{r^2 \sin^2\theta}$

می‌تواند از تکنیک جداسازی متغیرها بهره برد.

~~حال~~ حال مختصات دستگاه کروی را تحقیق کنیم. با نوشتن $\nabla^2$ در دستگاه کروی و جایگذاری فرم $k^2$ فوق در معادله هلمهولتز می‌توان نوشت:

$$\frac{1}{r^2}\partial_r(r^2\partial_r\psi) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\partial_\theta(\sin\theta\,\partial_\theta\psi) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\partial_\varphi^2\psi + f(r)\psi + \frac{g(\theta)}{r^2}\psi + \frac{h(\varphi)}{r^2\sin^2\theta}\psi = 0$$

حال اگر $\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$ فرض شود، با ضرب در $r^2$ و $\frac{1}{R\Theta\Phi}$ می‌توان نوشت:

$$\underbrace{\left\{\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + r^2 f(r)\right\}}_{\equiv \ell(\ell+1)} + \underbrace{\left[\frac{1}{\Theta}\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right) + g(\theta)\right]}_{=\frac{m^2}{\sin^2\theta} - \ell(\ell+1)} + \frac{1}{\sin^2\theta}\underbrace{\left[\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} + h(\varphi)\right]}_{\equiv -m^2} = 0$$

با توجه به اینکه معادله ما بدست آمده بوضوح جداشدنی مستقل از هم هستند

میتوان با تعاریف ثوابت $m^2$ و $l(l+1)$ معادلات فاضل را به سه معادله زیر

تفکیک داد:

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+f(r)\,R(r)-\frac{l(l+1)}{r^2}\,R(r)=0$$

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta(\theta)}{d\theta}\right)+g(\theta)+\left[l(l+1)-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\right]\Theta(\theta)=0$$

$$\frac{d^2\Phi(\varphi)}{d\varphi^2}+h(\varphi)\,\Phi(\varphi)+m^2\,\Phi(\varphi)=0$$

* برای مطالعه بیشتر به بخش ۹.۴ آرفکن ویرایش ۷ مراجعه کنید.

* همچنین لازم به ذکر است که معادله شرودینگر کاملا شبیه به معادله هلمهولتز است:

$$\nabla^2\psi+\underbrace{\frac{2m}{\hbar^2}(V-E)}_{=k^2}\psi=0$$

در صفحه قبل گفتیم

بنابراین اگر شکل $V=V(r,\theta,\varphi)$ در آن طوری باشد که قید مذکور در صفحه قبل را ارضا کند، میتوان از تکنیک جداسازی بهره برد.

پاسخ سوال اول (۲ نمره)

حال برای یک پتانسیل شعاعی $V(\vec{r}) = V(r)$ می‌توان دید که $-\frac{2m}{\hbar^2}V(r) = f(r)$ مشخصه آن می‌باشد

بنابراین می‌توان از جداسازی بهره برد و به معادله‌ی اولیه را تشکیل داد که البته پاسخ دو معادله که

زاویه‌ای آن معلوم است که $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ می‌شود و اما معادله‌ی شعاعی می‌شود.

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} + \Big\{\underbrace{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(r))}_{=k^2} - \frac{l(l+1)}{r^2}\Big\} u(r) = 0$$

یا به شکل مرسوم‌تر:

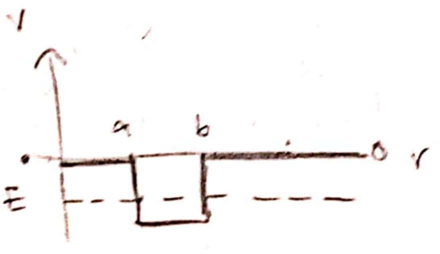
$$r^2\frac{d^2R}{dr^2} + 2r\frac{dR}{dr} + \{k^2r^2 - l(l+1)\} u(r) = 0$$

معادله‌ی فوق به معادله‌ی بسل (اگر $k^2>0$ باشد) یا معادله‌ی بسل تغییر یافته (اگر $k^2<0$ باشد) می‌رسد.

* اطلاعات بیشتر در بخش 7.10 آرفکن ویرایش 7.

* در واقع پاسخ معادله بسته به علامت $E - V(r)$ تعیین می‌شود.

* برای حالتی که به صورت زیر باشد:




در $0<r<a$ چون $E<0$ است ($V=0$) بنابراین $k^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}$ مثبت می‌باشد و پاسخ‌ها می‌شود:

$$R_{in} = A_{in}\, i_l(kr) + \cancel{B_{in}}^{\,0}\, k_l(kr)$$

که چون در $r \to 0$ ، $k_l \to \infty$ است و غیرفیزیکی است لذا $B_{in}=0$ باید باشد.

در $a<r<b$ چون $V_0<E<0$ یا $0<E-V$ بنابراین $k^2=\frac{2m(E-V)}{\hbar^2}$ را داریم و پاسخ‌ها را:

$$R_{well}=A_{well}\,j_\ell+B_{well}\,n_\ell$$

در $r>0$ چون مانند $0<r<a$ است داریم:

$$R_{out}=\cancel{A_{out}\,i_\ell}^{\,0}+B_{out}\,k_\ell$$

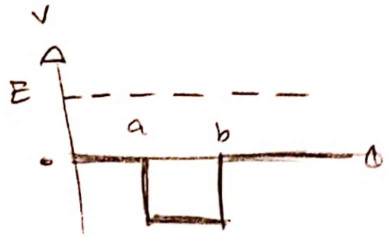
اما چون در $r\to\infty$، $i_\ell$ غیر فیزیکی است، $A_{out}=0$ باید باشد.

حال باید پیوستگی را در مرزها اعمال نمود:

$$R_{in}(a)=R_{well}(a) \qquad R_{out}(b)=R_{well}(b)$$

$$\left.\frac{dR_{in}}{dr}\right|_{r=a}=\left.\frac{dR_{well}}{dr}\right|_{r=b} \qquad \left.\frac{dR_{out}}{dr}\right|_{r=b}=\left.\frac{dR_{well}}{dr}\right|_{r=b}$$

* برای حالتی که به صورت زیر باشد:




در همه ی نواحی جواب ها توابع بسل کروی نوع اول دارد (نیومن ها باشند)

$$R_{in} = A_{in}\, j_l(kr) + \cancel{B_{in}\, n_l}(kr)$$

$$R_{well} = A_{well}\, j_l(k'r) + B_{well}\, n_l(k'r)$$

$$R_{out} = \cancel{A_{out}}\, j_l(kr) + B_{out}\, n_l(kr)$$

که در آن $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ و $k'^2 = \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}$ است. $A_{out}$ به دلیل $j_l(kr\to\infty)\to 0$ و $B_{in}$

به دلیل $n_l(kr\to 0)\to\infty$، صفر در نظر گرفته شده اند.

حال باید شرایط پیوستگی را اعمال نمود:

$$R_{in}(a) = R_{well}(a) \qquad R_{out}(b) = R_{well}(b)$$

$$\left.\frac{dR_{in}}{dr}\right|_{r=a} = \left.\frac{dR_{well}}{dr}\right|_{r=a} \qquad \left.\frac{dR_{out}}{dr}\right|_{r=b} = \left.\frac{dR_{well}}{dr}\right|_{r=b}.$$