پاسخ سری ششم تمرینات مکانیک کوانتومی پیشرفته ۲

پاسخ سوال اول

جداسازی متغیرها در حل معادله‌ی دیفرانسیل زیر که به معادله‌ی هلمهولتز موسوم است می‌تواند سودمند 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 برقرار بودن:

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

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

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

می‌تواند از تکنیک جداسازی متغیرها بهره برد.

حال می‌خواهیم قید k^2 در دستگاه کروی را تحقیق کنیم. با نوشتن ∇^2 در دستگاه کروی و جایگذاری قید k^2 فوق در معادله‌ی 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 فرض کنیم $\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$ با ضرب در r^2 و $\frac{1}{R\Theta\Phi}$ می‌توان نوشت:

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

با توجه به اینکه معادله‌ها بدست آمده به وضوح جداشدنی مستقل از هم هستند

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

تقلیل 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 9.6 آرفکن ویرایش 7 مراجعه کنید.

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

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

در مختصات کروی

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

پاسخ سوال (۱)

حال برای یک پتانسیل شعاعی $V = V(r)$ معادله‌ای که $-\frac{2m}{\hbar^2}V(r) = f(r)$ فقط تابع آن می‌شود

بنابراین می‌توان از جداسازی بهره برد و سه معادله‌ی ایند را تشکیل داد که البته پاسخ دو معادله‌ی

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

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

یا به شکل رسمی‌تر:

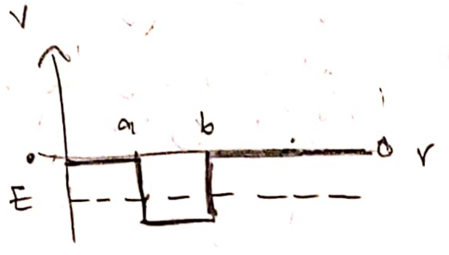
$$r^2\frac{d^2R}{dr^2} + 2r\frac{dR}{dr} + \{k^2r^2 - l(l+1)\} u(r) = 0$$

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

* اطلاعات بیشتر در بخش 7.14 آرفکن ویرایش 7.

* در واقع پاسخ معادله‌ی به دست آمده با توجه به علامت $E - V(r)$ تعیین می‌شود.

* حالتی که به صورت زیر باشد:



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

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

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

در $a<r<b$ چون $V_0<E<0$ یا $0<E-V$ بنابراین $K^2=\frac{2m(E-V)}{\hbar^2}$ مثبت است و پاسخ‌ها کروی‌اند

$$R_{well}=A_{well}\,j_l+B_{well}\,n_l$$

در $b<r$ چون مانند $0<r<a$ است داریم:

$$R_{out}=\cancel{A_{out}\,i_l}+B_{out}\,k_l$$

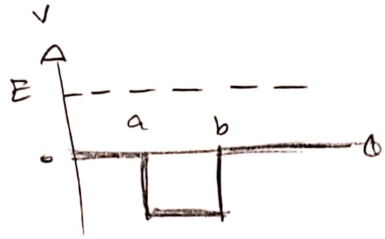
اما چون $r\to\infty$ ، $i_l\to\infty$ غیر فیزیکی است ، $A_{out}=0$ باید باشد.

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 و دوم (نیومن) هستند:

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

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

$$R_{out} = \cancel{A_{out}}^{\,\to 0}\, j_l(kr) + B_{out}\, n_l(kr)$$

که در آنها $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ و $k'^2 = \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}$ است، A_{out} به دلیل $j(kr\to\infty)\to\infty$ 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:

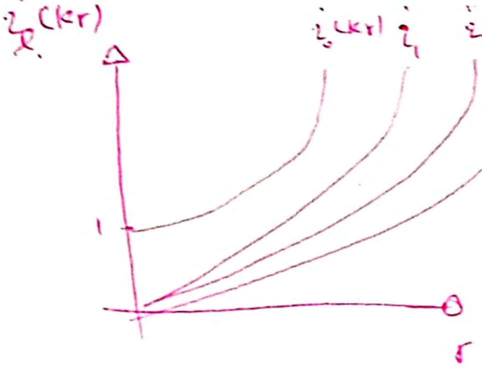
$$R_{in}(a) = R_{well}(a) \qquad R_{out}(b) = R_{well}(b)$$

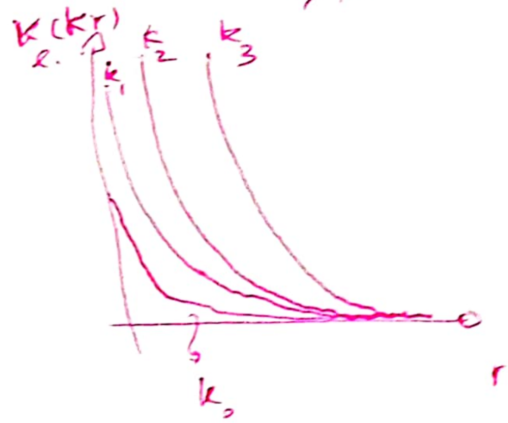
$$\left.\frac{dR_{in}}{dr}\right|_{r=a} = \left.\frac{dR_{well}}{dr}\right|_{r=a} \qquad \left.\frac{dR_{out}}{dr}\right|_{r=b} = \left.\frac{dR_{well}}{dr}\right|_{r=b}.$$

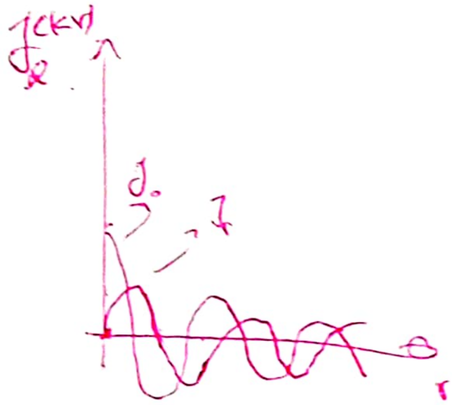
* حال توجه شود در حالت $0 < E < V_0$ انتظار داریم که در نواحی $r < a$ و $r > b$ تابع موج کاهش یافته و صفر شود ولی انتظار دیدن تونل زنی هم داریم.

حال با این حال در فاصله $a < r < b$ انتظار داریم تابع موج نوسانی ببینیم.

این شواهد فیزیکی را در توابع به دست آمده مان ببینیم.







* در حالتی که $E > 0$ است، انتظار داریم در کل ناحیه ذره آزاد باشد، یعنی

انتظار داشتن تابع موج نوسانی در کل نواحی انتظار می رود که کاملاً

مطابق با پاسخ بدست آمده ما است که ترکیبی از j_ℓ و n_ℓ است که هر دو نوسانی اند