Cơ học lượng tử 3

TRẦN KHÔI NGUYÊN

VẬT LÝ LÝ THUYẾT

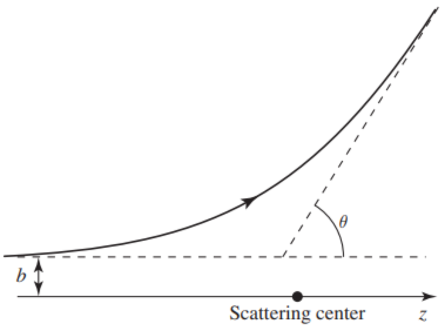
Ngày 10 tháng 11 năm 2024

Mục lục

Chương 1

Lý thuyết tán xạ

1.1 Giới thiệu tán xạ

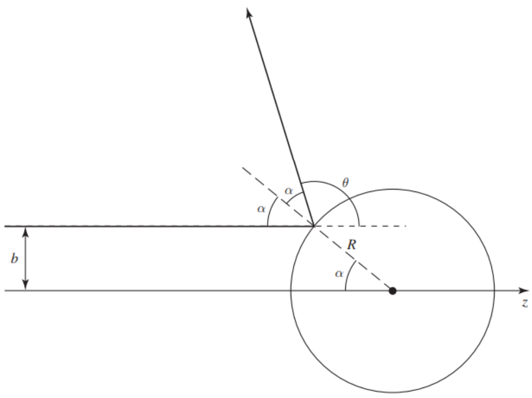


b: tham số ảnh hưởng

θ: góc tán xạ

b$\downarrow$ thì $\theta \uparrow$ nên θ là hàm giảm

Trong cổ điển:(đối xứng trụ)



$$b > R \Rightarrow \theta = 0$$

$$\theta = \pi - 2\alpha$$

$$\Rightarrow \sin\alpha = \frac{b}{R} \Rightarrow b = R\sin\left(\frac{\pi-\theta}{2}\right) = R\cos\frac{\theta}{2}$$

$$\text{với } \theta = 2\cos^{-1}\frac{b}{R}; \quad b < R$$

$$\theta = 0; \quad b > R$$

Mối liên hệ giữa $d\sigma$ và $d\phi$

$$d\sigma = b\,dbd\phi(\text{từ công thức gốc } rdrd\phi)$$

Góc khối $d\Omega$

$$d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$$

Tổng quát (không có đối xứng trụ)

$$d\sigma = D(\theta)d\omega$$

$$\begin{aligned} D(\theta) &= \text{ tiết diện tán xạ vi phân} \\ &= \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{bdbd\phi}{\sin\theta d\theta d\phi} = \frac{b}{\sin\theta}\left|\frac{db}{d\theta}\right| \end{aligned} \quad (1.1)$$

$*$ **Tiết diện tán xạ toàn phần**

$$\sigma = \int D(\theta)d\Omega$$

$*$ thử thay b vào

$$\begin{aligned} D(\theta) &= R\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\frac{1}{\sin\theta}R\frac{1}{2}\left|-\sin\frac{\theta}{2}\right| \\ &= \frac{R^2}{4} \\ \sigma &= \int\frac{R^2}{4} = \pi R^2 \end{aligned}$$

$*$ số hạt trên 1 đơn vị diện tích

$$dN = \mathcal{L}d\sigma$$

trong đó $\mathcal{L}$ = số hạt / đơn vị diện tích / đơn vị thời gian $\Rightarrow D\theta = \dfrac{dN}{\mathcal{L}d\Omega}$

Trong lượng tử

$$\psi = A\left[e^{i\mathbf{k}z} + f(\theta)\frac{e^{i\mathbf{kr}}}{\mathbf{r}}\right] \tag{1.2}$$

trong đó $e^{i\mathbf{k}z}$ đại diện cho chùm tia tới, và $\dfrac{1}{\mathbf{r}}$ để đảm bảo bảo toàn xác suất.

∗ z và r ≫ xa tâm tán xạ

$$|\psi|^2 d\mathbf{V} = |\psi|^2 r^2 d\mathbf{r} d\Omega$$

∗ Tán xạ đàn hồi

Số hạt tới

$$\begin{aligned} dP &= |\psi_{in}| d\mathbf{V} \\ &= |A|^2 v dt d\sigma \end{aligned}$$

Số hạt tán xạ

$$\begin{aligned} dP &= |\psi_{scatter}| d\mathbf{V} \\ &= |A|^2 |f|^2 \frac{1}{r^2} v dt d\Omega \end{aligned}$$

∗t ≪

$$\begin{aligned} &\Rightarrow d\sigma = |f|^2 d\Omega \\ &\Rightarrow |f|^2 \equiv D(\theta) \end{aligned}$$

Mục tiêu của chúng ta vẫn là đi tìm $D(\theta)$ và biên độ tán xạ $f(\theta)$;điều này mô tả xác suất tán xạ được cho bởi theo hướng θ. Ta đi giải phương trình Schrödinger để đi tìm f thông qua gần đúng Born hoặc gần đúng sóng riêng phần.

Trong 2D: $\psi_{scatter} = f(\theta)\dfrac{e^{ik\mathbf{r}}}{\sqrt{\mathbf{r}}}$

∗ Tìm $f(\theta)$

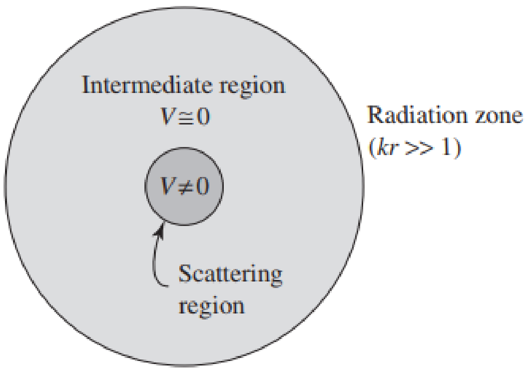
Thế năng hướng tâm (Radial potential)

$$\psi(n\theta,\phi) = R(\mathbf{r})Y_{m\ell}(\theta,\phi)$$
$$R(\mathbf{r}) = \frac{U(\mathbf{r})}{\mathbf{r}}$$
$$\mathbf{r} = 0...\infty; \theta = 0...\pi; \phi = 0...2\pi$$

trong đó $Y_{ml}(\theta,\phi)$ là hàm điều hòa cầu.

Phương trình Schrödinger

$$-\frac{\hbar}{2m}u'' + \left[V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{2m}\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right]u = Eu$$



∗ Điều kiện biên (E>0)

Vùng (3)

$$u'' = -\frac{2mE}{\hbar^2}u = -k^2u$$
$$\Rightarrow u'' + k^2u = 0$$
$$\Rightarrow u(\mathbf{r}) = Ce^{i\mathbf{kr}} + De^{-i\mathbf{kr}}$$

Do vùng (3) là vùng ở xa, nên hạt không bật lại $\Rightarrow D = 0 \Rightarrow u(\mathbf{r}) = Ce^{i\mathbf{kr}}$.

Tại vùng r $\gg$,nên:

$$R(r) \sim \frac{e^{i\mathbf{kr}}}{\mathbf{r}}$$

Vùng (2): vùng trung gian, $V = 0$

$$u'' - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}u = -k^2 u$$
$$\Rightarrow u(r) = Arj_\ell(kr) + Brn_\ell(kr)$$

Nghiện của nó chính là tổ hợp tuyến tính của hàm cầu Bessel.

Khái niệm mới: Hàm Hankel cầu:

$$h_\ell^{(1)}(r) \equiv j_\ell(r) + in_\ell(r); \quad h_\ell^{(1)}(r) \equiv j_\ell(r) - in_\ell(r) \tag{1.3}$$

với $r \gg$ thì 2 hàm trên tương đương với $\dfrac{e^{i\mathbf{kr}}}{r}$ và $\dfrac{e^{-i\mathbf{kr}}}{r}$. $R(r) \sim h_\ell^{(1)}(kr)$

$*$Vùng V = 0

$$\psi(r,\theta,\phi) = A\left[e^{i\mathbf{kz}} + \sum_{l,m} C_{l,m} h_l^{(1)}(kr) Y_l^m(\theta,\phi)\right]$$

Số hạng thứ nhất là của sóng tới, và phần tổng chính là của sóng tán xạ. Nhưng khi chúng ta giả định rằng, thế năng là đối xứng cầu, nên hàm sóng không phụ thuộc vào ϕ. Vậy nên chỉ còn số hạng $m = 0$ là còn tồn tại.

$$Y_\ell^0(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} P_\ell(\cos\theta)$$

Vậy nên hàm sóng đơn giản thành:

$$\psi(r,\theta)_{(2)} = A\left[e^{i\mathbf{kz}} + k\sum_{l=0}^{\infty} i^{\ell+1}(2\ell+1)a_\ell h_\ell^{(1)}(kr) P_\ell(\cos\theta)\right]$$

trong đó a_l còn được gọi là biên độ sóng riêng phần thứ ℓ, kí hiệu $\psi(r,\theta)_{(2)}$ cho biết hàm sóng ở vùng số (2)

Quay lại vùng (3), hàm Hankel trở thành:

$$h_\ell^{(1)}(kr) \rightarrow (-i)^{\ell+1}\frac{e^{ikr}}{kr}$$

và hàm sóng:

$$\psi(r,\theta) \approx A\left[e^{ikz} + f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}\right]$$

trong đó:

$$\begin{aligned}
f(\theta) &= \sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)a_\ell P_\ell(\cos\theta) \\
D(\theta) &= \left|f(\theta)\right|^2 \\
&= \sum_{\ell\ell'}(2\ell+1)(2\ell'+1)a_\ell^* a_{\ell'} + P_\ell(\cos\theta)P_\ell^*(\cos\theta) \\
\sigma &= \int D(\theta)\sin\theta d\theta d\phi \\
&= \sum_{\ell,\ell'}(2\ell+1)(2\ell'+1)a_\ell^* a_\ell 2\pi \int P_\ell^*(\cos\theta)P_\ell(\cos\theta)d\theta \\
&= 4\pi\sum_\ell(2\ell+1)|a_\ell|^2
\end{aligned}$$

Do tính trực giao của hàm Legendre, nên tích phân sẽ thành là $\dfrac{2}{2\ell+1}\delta_{\ell\ell'}$

Quả cầu , ta có điều kiện biên và nhờ vào hệ thức Rayleigh

$$\begin{aligned}
V &= \infty; \quad r < R \\
&= 0; \quad r > R \\
\psi(r &= R) = 0
\end{aligned}$$

Rayleigh's formula *

$$e^{ikz} = \sum_{\ell=0}^{\infty} i^\ell(2\ell+1)j_\ell(kr)P_\ell(\cos\theta)* \tag{1.4}$$

$$\Rightarrow \psi_2 = A\sum_{\ell=0}^{\infty} i^\ell(2\ell+1)P_\ell(\cos\theta)\left[j_\ell(kr) + ika_\ell h^1(kr)\right] = 0 \tag{1.5}$$

$$\Rightarrow a_\ell = i\frac{j_\ell(kR)}{kh_\ell^{(1)}(kR)}$$

Tiết diện toán xạ toàn phần

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2}\sum_\ell(2\ell+1)\left|\frac{j_\ell(kR)}{h_\ell^{(1)}(kR)}\right|^2$$

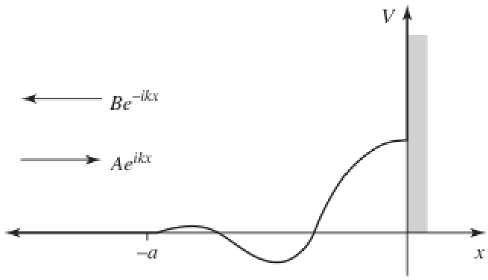
Nhưng chúng ta đang giả sử rằng ở gần đúng bước sóng dài $kR \ll 1$ nên ta có được:

$$\sigma = 4\pi R^2 \quad \Rightarrow \text{Đặc trưng của tán xạ bước sóng dài}$$

1.2 Dịch chuyển pha

Hàm sóng tổng quát được khai triển dưới dạng: $\sum_{\ell=0} a_\ell$... trong đó a_ℓ là phức.

Xét trường hợp 1D:



Để bảo toàn số hạt:

$$|A|^2 = |B|^2$$

$$B = \pm A e^{i\delta} \rightarrow \text{ thừa số pha}$$

$$\text{hoặc } B = \pm A e^{2i\delta}$$

Nếu như không có vùng "line"(đồng nghĩa là chỉ có một tường chắn tại $x = 0$) thì đơn giản là $B = -A$ và hàm sóng là:

$$\psi(x) = A(e^{ikx} - e^{-ikx}) \qquad (V(x) = 0).$$

Với $V(x) \neq 0$, hàm sóng cho $(x < -a)$:

$$\psi(x) = A(e^{ikx} - e^{-ikx}e^{i2\delta}) \qquad (V(x) \neq 0).$$

Thừa số pha xảy ra khi giải phương trình Schrödinger tại vùng tán xạ $(-a < x < 0)$. Sóng tới và sóng phản xạ có thêm phần dịch chuyển pha, tâm tán xạ có nhiệm vụ làm cho pha của hàm sóng bị dịch chuyển pha.

Xét trường hợp 3D:

Sóng tới lan truyền theo trục z (Ae^{ikz}) không chứa thành phần. Bằng cách áp dụng công thức Rayleigh, ta khai triển sóng tới theo tổ hợp của các sóng cầu:

$$\psi_\ell(r) = A\, i^\ell\, (2\ell + 1)\, j_\ell(kr) P_\ell(\cos\theta) \qquad (V(r) = 0). \tag{1.6}$$

Nhưng từ (1.3):

$$j_\ell(x) = \frac{1}{2}\left[h_\ell^{(1)}(x) + h_\ell^{(1)}(x)\right] \xrightarrow{x\gg 1} \approx \frac{1}{2x}\left[(-i)^{\ell+1}e^{ix} + (i)^{\ell+1}e^{-ix}\right] \tag{1.7}$$

Vậy, với $r \gg \to$(1.7)

$$\psi = Ai^\ell(2\ell+1)\frac{1}{2kr}\left[(-i)^{\ell+1}e^{ikr} + i^{\ell+1}e^{-ikr}\right]P_\ell(\cos\theta)$$

$$\psi = \frac{A(2\ell+1)}{2ikr}\left[e^{ikr} - e^{-ikr}(-1)^\ell\right]P_\ell(\cos\theta) \qquad (V(r)=0) \tag{1.8}$$

Số hạng thứ hai nằm trong [ ] đại diện cho sóng cầu tới, nó đến từ sóng phẳng tới, và không đổi cho tới khi đưa một thế mới vào.

$$\psi_\ell(r) = \frac{A(2\ell+1)}{2ikr}\left[e^{i(kr+2\delta_\ell)} - e^{-ikr}(-1)^\ell\right]P_\ell(\cos\theta) \qquad (V(r)\neq 0) \tag{1.9}$$

Từ phương trình sóng trong công thức Rayleigh (1.5):

$$\psi_\ell(r) = A\sum_{\ell=0}^{\infty} i^\ell(2\ell+1)P_\ell(\cos\theta)\left[j_\ell(kr) + ika_\ell h^1(kr)\right] = 0$$

với $r \gg 1$

$$\psi_\ell(r) = \frac{A(2\ell+1)}{i2kr}\left[e^{ikr} - i^\ell e^{-ikr}\right]P_\ell(\cos\theta) + Ai^\ell ka_\ell\frac{1}{kr}(-i)^{2\ell+1}e^{ikr}P_\ell(\cos\theta)(2\ell+1)$$

$$\Rightarrow a_\ell = \frac{e^{2i\delta_\ell}}{2ik} = \frac{1}{k}e^{i\delta_\ell}\sin\delta_\ell \tag{1.10}$$

Ráp vô $f(\theta) = \sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)a_\ell P_\ell(\cos\theta)$

$$f(\theta) = \frac{1}{k}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)e^{i\delta_\ell}\sin\delta_\ell P_\ell\cos\theta \tag{1.11}$$

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)e^{i\delta_\ell}\sin^2\delta_\ell \tag{1.12}$$

1.3 Gần đúng Born

Phương trình Schrödinger:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi = E\psi \qquad E>0 \tag{1.13}$$

Viết lại dưới dạng phương trình Hemholtz(phương trình đạo hàm riêng không thuần nhất):

$$(\nabla^2 + k^2)\psi = \mathcal{Q} \tag{1.14}$$

Phương pháp hàm riêng

$$(\nabla^2 + k^2)G(\mathbf{r}) = \delta^3(\mathbf{r}), \qquad \delta^3(\mathbf{r}) = \delta(x)\delta(y)\delta(z) \tag{1.15}$$

Hàm $G(\mathbf{r})$ là $\notin V$,

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) &= \int G(\mathbf{r}-\mathbf{r_0})\mathcal{Q}(\mathbf{r_0})d\mathbf{r_0} \\ \Rightarrow (\nabla^2 + k^2)\psi(\mathbf{r}) &= \int \left[(\nabla^2 + k^2)G(\mathbf{r}-\mathbf{r_0})\right]\mathcal{Q}(\mathbf{r_0})d\mathbf{r_0} = \mathcal{Q}(\mathbf{r}) \end{aligned} \tag{1.16}$$

Hàm Green của phương trình Hemholtz

Khai triển Fourier, ta tìm ảnh của hàm Green(HG):

$$\begin{cases} G(\mathbf{r}) &= \dfrac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}\displaystyle\int e^{i\mathbf{s}\cdot\mathbf{r}}g(\mathbf{s})d\mathbf{s} \\ \delta^3(\mathbf{r}) &= \dfrac{1}{(2\pi)^3}\displaystyle\int e^{i\mathbf{s}\cdot\mathbf{r}}d\mathbf{s} \end{cases} \tag{1.17}$$

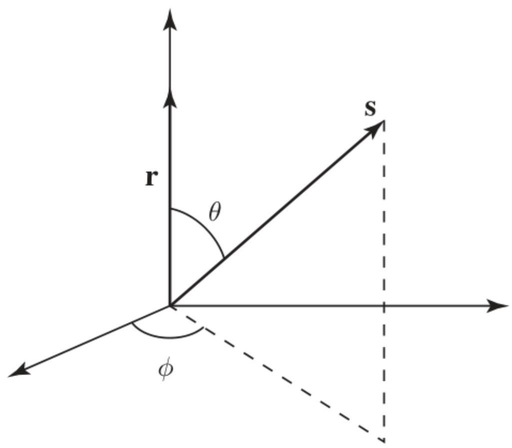
Thế vô (1.14):

$$\frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}\int(-s^2 + k^2)e^{i\mathbf{s}\cdot\mathbf{r}}g(\mathbf{s})d\mathbf{s} = \frac{1}{(2\pi^3)}\int e^{i\mathbf{s}\cdot\mathbf{r}}d\mathbf{s}. \tag{1.18}$$

Dẫn ra được ảnh của HG:

$$g(\mathbf{s}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}(k^2 - s^2)} \Rightarrow G(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int \frac{e^{i\mathbf{s}\cdot\mathbf{r}}}{k^2 - s^2}d\mathbf{s} \tag{1.19}$$

Chọn r cố định $\rightarrow$ chọn trục z để thuận tiện trong việc tính toán (z theo r)



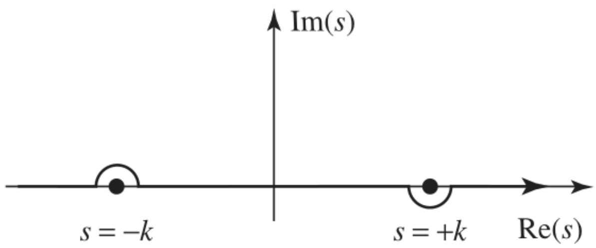
$$
\begin{cases}
\mathbf{s}\cdot\mathbf{r} & = sr\cos\theta \\
d\mathbf{s} & = s^2 ds\sin\theta d\theta d\phi \\
\int d\phi & = 2\pi
\end{cases}
\tag{1.20}
$$

Tích phân theo $d\theta$:

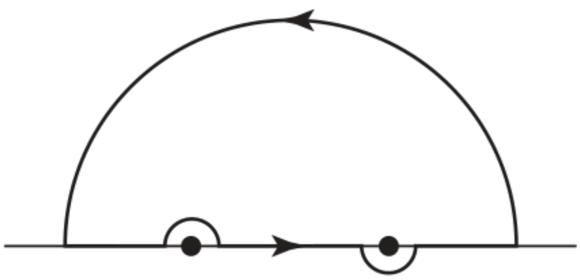
$$
\begin{aligned}
\int_0^\pi = e^{i\mathbf{s}\cdot\mathbf{r}}\sin\theta d\theta = -\frac{e^{isr\cos\theta}}{isr}\bigg|_0^\pi \\
= \frac{e^{isr}-e^{-isr}}{isr}
\end{aligned}
\tag{1.21}
$$

Do đó HG có dạng:

$$
\begin{aligned}
G(\mathbf{r}) &= \frac{2\pi}{(2\pi)^3}\int_0^\pi \frac{s^2}{k^2-s^2}\frac{e^{isr}-e^{-isr}}{isr} \\
&= \frac{i}{8\pi^2 r}\left[\int_{-\infty}^{\infty}\frac{se^{isr}}{k^2-s^2}ds - \int_{-\infty}^{\infty}\frac{se^{-isr}}{k^2-s^2}ds\right] && (1.22) \\
&= \frac{i}{8\pi^2 r}\left[I_1+I_2\right] && (1.23)
\end{aligned}
$$



Ta chọn contour cho I_1 là:



để tránh cho e^{isr} tiến ra vô cùng thì k phải là số dương $\gg$

$$
I = i\pi e^{ikr}
$$

và chọn cho I_2 là countour đóng dưới, với k phải là số âm $\gg$:

$$I_2 = -i\pi e^{ikr}$$

Vậy hàm Green sẽ có dạng là:

$$G(\mathbf{r}) = -\frac{e^{ikr}}{4\pi r}. \tag{1.24}$$

Nghiệm riêng của hàm sóng:

$$\psi_p = \int -\frac{e^{ik\mathbf{r}}}{4\pi\mathbf{r}} = \int -\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r_0}|}}{4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r_0}|}\frac{2m}{\hbar}V(\mathbf{r_0})\psi(\mathbf{r_0})d\mathbf{r_0} \tag{1.25}$$

Nghiệm tổng quát:

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{r}) &= \psi_0(\mathbf{r}) + \psi_p \\ &= \psi_0 + \int gV\psi = \psi_0 + \left(\int gV(\psi_0 + \int gV\psi)\right)\end{aligned} \tag{1.26}$$

Đây chính là gần đúng Born bậc 1, trong đó g chính là ảnh của hàm Green, và g phải nhỏ.

1.4 Bài tập Griffiths

Prob 10.2/p.379

Problem 10.2 Construct the analogs to Equation 10.12 for one-dimensional and two-dimensional scattering.

Giải

Prob 10.3/p.384

Chứng minh công thức (10.33)

$$a_\ell = i\frac{j_\ell(ka)}{kh_\ell^{(1)}(ka)},$$

từ công thức

$$\sum_{\ell=0}^{\infty} i^\ell(2\ell+1)\left[j_\ell(ka) + ika_\ell h_\ell^{(1)}(ka)\right]P_\ell(\cos\theta) = 0 \tag{1}$$

Giải

Từ công thức (4.34)

$$\int_{-1}^{1} P_\ell(x) P_{\ell'}(x) = \frac{2}{2\ell+1}\delta_{\ell\ell'},$$

đặt

$$x = \cos\theta \to dx = \sin\theta d\theta$$

ta viết lại công thức (4.34) dưới dạng cos

$$\int_{-\pi}^{\pi} P_\ell(\cos\theta) P_{\ell'}(\cos\theta)\sin\theta d\theta = \frac{2}{2\ell+1}\delta_{\ell\ell'}.$$

Tích phân (1) theo θ trên đoạn $[0, \pi]$

$$\int_{-\pi}^{\pi}\sum_{\ell,\ell'=0}^{\infty} i^\ell(2\ell+1)\left[j_\ell(ka) + ika_\ell h_\ell^{(1)}(ka)\right] P_\ell(\cos\theta)P_{\ell'}(\cos\theta)\sin\theta d\theta = 0$$

$$i^{\ell'}(2\ell'+1)\left[j_{\ell'}(ka) + ika_{\ell'} h_{\ell'}^{(1)}(ka)\right]\frac{2}{2\ell'+1} = 0 \Rightarrow DPCM$$

Prob 10.4/p.387

Prob 10.5/p.387

Problem 10.5 A particle of mass m and energy E is incident from the left on the potential

$$V(x) = \begin{cases} 0, & (x < -a), \\ -V_0, & (-a \le x \le 0), \\ \infty, & (x > 0). \end{cases}$$

(a) If the incoming wave is Ae^{ikx} (where $k = \sqrt{2mE}/\hbar$), find the reflected wave. *Answer:*

$$Ae^{-2ika}\left[\frac{k - ik'\cot(k'a)}{k + ik'\cot(k'a)}\right]e^{-ikx}, \text{ where } k' = \sqrt{2m(E+V_0)}/\hbar.$$

(b) Confirm that the reflected wave has the same amplitude as the incident wave.

(c) Find the phase shift δ (Equation 10.40) for a very deep well ($E \ll V_0$). *Answer:* $\delta = -ka$.

Giải:

(a) Tại $V(x) = 0$, hàm sóng cho vùng này là:

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

Tại $V(x) = -V_0$, phương trình Schrödinger cho vùng này là:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} - V_0\psi = E\psi \Rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} = -(k')^2\psi$$

Hàm sóng cho vùng này là:

$$\psi(x) = C\sin\big(k'x\big) + D\cos\big(k'x\big),$$

$\psi(0) = \psi(-a) = 0$ nên $D = 0$:

$$\psi(x) = C\sin\big(k'x\big)$$

Điều kiện liên tục cho $\psi(x)$ và $\dfrac{d}{dx}\psi(x)$ tại $x = -a$

$$\begin{cases} Ae^{-ika} + Be^{ika} & = C\sin\big(-k'a\big) \\ ikAe^{-ika} - ikBe^{ika} & = k'C\cos\big(k'a\big) \end{cases}$$

$$\Rightarrow \frac{ik(Ae^{-ika} - Be^{ika})}{Ae^{-ika} + Be^{ika}} = \frac{k'C\cos\big(k'a\big)}{C\sin(-k'a)} = \frac{k'\cos\big(k'a\big)}{\sin(-k'a)} = -k'\cot\big(k'a\big)$$

$$\Rightarrow -(Ae^{-ika} + Be^{ika})k'\cot\big(k'a\big) = ik(Ae^{-ika} - Be^{ika})$$

$$\Rightarrow -Ae^{-ika}k'\cot\big(k'a\big) - Be^{ika}k'\cot\big(k'a\big) = ik(Ae^{-ika} - Be^{ika})$$

$$\Rightarrow -Ae^{-ika}\left(k'\cot\big(k'a\big) + ik\right) + Be^{ika}(-k'\cot\big(k'a\big) + ik) = 0$$

$$\Rightarrow B = A\frac{e^{-ika}\left(k'\cot\big(k'a\big) + ik\right)}{-k'\cot(k'a) + ik}e^{-ika} = A\frac{k'\cot\big(k'a\big) + ik}{-k'\cot(k'a) + ik}e^{-2ika}(dpcm)$$

(b)

$$\begin{aligned} |B|^2 &= \left|A\frac{k'\cot\big(k'a\big) + ik}{-k'\cot(k'a) + ik}e^{-2ika}\right|^2 \\ &= \left[A\frac{k'\cot\big(k'a\big) + ik}{-k'\cot(k'a) + ik}e^{-2ika}\right] \times \left[A^*\frac{k'\cot\big(k'a\big) - ik}{-k'\cot(k'a) - ik}e^{2ika}\right] \\ &= |A|^2 \end{aligned}$$

(c) Ta viết lại hàm sóng

$$\begin{aligned} \psi(x) = Ae^{ikx} + A\frac{k'\cot\big(k'a\big) + ik}{-k'\cot(k'a) + ik}e^{-2ika}e^{-ikx} \\ \Rightarrow A\left(e^{ikx} + \frac{k'\cot\big(k'a\big) + ik}{-k'\cot(k'a) + ik}e^{-2ika}e^{-ikx}\right), \end{aligned}$$

mà

$$\psi(x) = A\left(e^{ikx} - e^{i(2\delta - kx)}\right).$$

Như vậy ta có

$$\frac{k'\cot\big(k'a\big)+ik}{-k'\cot(k'a)+ik}e^{-2ika}=-e^{i2\delta}$$
$$\Rightarrow \delta=-ka$$

Prob 10.6/p.387

Dịch chuyển pha(δ_ℓ) của sóng riêng phần cho tán xạ quả cầu cứng là ?

Giải:

Ta có

$$a_\ell = i\frac{j_\ell(ka)}{kh_\ell^{(1)}(ka)},$$

và mối liên hệ giữa a_ℓ và δ_ℓ

$$a_\ell=\frac{1}{k}e^{i\delta_\ell}\sin\delta_\ell.$$

Như vậy

$$\begin{aligned}
& i\frac{j_\ell(ka)}{kh_\ell^{(1)}(ka)}=\frac{1}{k}e^{i\delta_\ell}\sin\delta_\ell\\
& \Rightarrow e^{i\delta_\ell}\sin\delta_\ell = i\frac{j_\ell(ka)}{h_\ell^{(1)}(ka)}\\
& \Rightarrow (\cos\delta_\ell+i\sin\delta_\ell)\sin\delta_\ell = i\frac{j_\ell}{j_\ell+in_\ell}\\
& \Rightarrow (\cos\delta_\ell+i\sin\delta_\ell)\sin\delta_\ell = i\frac{1}{1+i\frac{n_\ell}{j_\ell}}=i\frac{1-i\frac{n_\ell}{j_\ell}}{1+\left(\frac{n_\ell}{j_\ell}\right)^2}\\
& \Rightarrow \begin{cases}\cos\delta_\ell\sin\delta_\ell=\dfrac{\frac{n_\ell}{j_\ell}}{1+\left(\frac{n_\ell}{j_\ell}\right)^2}\\[2ex] \sin^2\delta_\ell=\dfrac{1}{1+\left(\frac{n_\ell}{j_\ell}\right)^2}\end{cases}
\end{aligned}$$

Chia hai vế phương trình ta được

$$\tan\delta_\ell=\frac{j_\ell}{n_\ell}(DPCM)$$

Prob 10.7/p.387

Tìm hàm sóng orbital $S(\ell = 0)$, với dịch chuyển pha $\delta_0(k)$ trong trường hợp tán xạ với thế là hàm delta. Giả sử hàm sóng xuyên tâm $u(r)$ đi từ 0, $r \to 0$.

$$-\cot^{-1}\left[\cot(ka) + \frac{ka}{\beta \sin^2 ka}\right], \qquad \text{với } \beta \equiv \frac{2m\alpha a}{\hbar^2}$$

Giải:

Prob 10.8/p.391

Từ (10.52)

$$\left(\nabla^2 + k^2\right) G(\mathbf{r}) = \delta^3(\mathbf{r}).$$

Chứng minh rằng:

$$G(\mathbf{r}) = \frac{i}{8\pi^2 r}\left[\left(i\pi e^{ikr}\right) - \left(-i\pi e^{ikr}\right)\right] = -\frac{i\pi e^{ikr}}{4\pi r}.$$

Giải:

Xét VP

$$\left(\nabla^2\left(\frac{i\pi e^{ikr}}{4\pi r}\right) + k^2\frac{i\pi e^{ikr}}{4\pi r}\right)$$
$$= \left(\nabla^2\left(i\pi e^{ikr}\right)\frac{1}{4\pi r} + \nabla^2\left(\frac{1}{4\pi r}\right)i\pi e^{ikr} + k^2\frac{i\pi e^{ikr}}{4\pi r}\right) = \delta^3(\mathbf{r}).$$

Prob 10.9/p.391

Chứng minh rằng ở trạng thái cơ bản của nguyên tử Hidro (Eq 4.80) thỏa dạng tích phân của phương trình Schrödinger tức là thoã mãn được phương trình (10.67), với E và V tương ứng(chú ý rằng $E < 0$, nên $k = i\kappa$, với $\kappa \equiv \sqrt{-2mE}/\hbar$).

Giải:

Hàm sóng ở tại trạng thái cơ bản của nguyên tử Hidro có dạng là

$$\psi_{100}(r,\theta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}e^{-\frac{r}{a}}.$$

Ta có phương trình số (10.67) cho trường hợp không có sóng tới

$$\psi(\mathbf{r}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|}V(\mathbf{r}_0)\psi(\mathbf{r}_0)d\mathbf{r}_0, \tag{1}$$

thế năng (eq4.52)

$$V(\mathbf{r}) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r} = -\frac{\hbar^2}{ma}\frac{1}{r},$$

với $k = i\kappa = i\sqrt{-2mE}/\hbar = \dfrac{i}{a}$. Thay tất cả vô (1) ta được

$$\begin{aligned}
\psi(\mathbf{r}) &= \frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}\frac{\hbar^2}{ma}\int \frac{e^{-\frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|}{a}}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|}\frac{1}{r_0}e^{-\frac{r_0}{a}}d\mathbf{r}_0 \\
&= \frac{1}{2\pi a}\frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}\int \frac{\exp\left(-\frac{\sqrt{r^2+r_0^2-2rr_0\cos\theta}}{a}\right)\exp\left(-\frac{r_0}{a}\right)}{r_0\sqrt{r^2+r_0^2-2rr_0\cos\theta}}r_0^2\sin\theta dr_0 d\theta d\phi \\
&= \frac{1}{2\pi a}\frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}\int_0^{2\pi}d\phi\int_0^\infty\left[\int_0^\pi \frac{\exp\left(-\frac{\sqrt{r^2+r_0^2-2rr_0\cos\theta}}{a}\right)\exp\left(-\frac{r_0}{a}\right)}{\sqrt{r^2+r_0^2-2rr_0\cos\theta}}r_0\sin\theta d\theta\right]dr_0 \\
&= \frac{1}{2\pi a\sqrt{\pi a^3}}\int_0^{2\pi}d\phi\int_0^\infty r_0\exp\left(-\frac{r_0}{a}\right)\left[\int_0^\pi \frac{\exp\left(-\frac{\sqrt{r^2+r_0^2-2rr_0\cos\theta}}{a}\right)}{\sqrt{r^2+r_0^2-2rr_0\cos\theta}}\sin\theta d\theta\right]dr_0.
\end{aligned} \tag{2}$$

Đặt $x = \cos\theta \Rightarrow dx = -\sin\theta d\theta$, ta được số hạng bên trong bracket là

$$\begin{aligned}
&\int_0^\pi \frac{\exp\left(-\frac{\sqrt{r^2+r_0^2-2rr_0\cos\theta}}{a}\right)}{\sqrt{r^2+r_0^2-2rr_0\cos\theta}}\sin\theta d\theta \\
&= \int_1^{-1} -\frac{\exp\left(-\frac{\sqrt{r^2+r_0^2-2rr_0 x}}{a}\right)}{\sqrt{r^2+r_0^2-2rr_0 x}}dx.
\end{aligned}$$

$$\text{Đặt}\begin{cases} u = \sqrt{r^2+r_0^2-2rr_0x} \to x = \dfrac{r^2+r_0^2-u^2}{2rr_0} \\ du = -\dfrac{rr_0}{\sqrt{r^2+r_0^2-2rr_0x}}dx = -\dfrac{rr_0}{u}dx \to dx = -\dfrac{u}{rr_0}du, \end{cases}$$

vậy ta có

$$\int_{r-r_0}^{r+r_0}\frac{\exp\left(-\frac{u}{a}\right)}{u}\frac{-u}{rr_0}du = -\frac{a}{rr_0}\exp(-u/a)\Big|_{r-r_0}^{r+r_0} = -\frac{a}{rr_0}\left[\exp\left(-\frac{r+r_0}{a}\right) - \exp\left(-\frac{r-r_0}{a}\right)\right].$$

Thay vào (2) ta được

$$\psi(\mathbf{r}) = -\frac{1}{r\sqrt{\pi a^3}}\int_0^\infty e^{-r_0/a}\left[\exp\left(-\frac{r+r_0}{a}\right) - \exp\left(-\frac{r-r_0}{a}\right)\right]dr_0$$
$$= \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}e^{-r/a} = \psi(r)(DPCM)$$

Prob 10.10/p.395

Prob 10.11/p.395

Tính tích phân sau

$$f(\theta) \approx -\frac{2m\beta}{\hbar^2\kappa}\int_0^\infty e^{-\mu r}\sin(\kappa r)dr = -\frac{2m\beta}{\hbar^2(\mu^2+\kappa^2)}. \qquad (1)$$

Ta có $\sin\kappa r = \dfrac{e^{i\kappa r} - e^{-i\kappa r}}{2i}$, thay vào (1) ta được

$$\int_0^\infty e^{-\mu r}\sin(\kappa r)dr = \frac{1}{2i}\int_0^\infty e^{(i\kappa-\mu)r} - e^{-(i\kappa+\mu)r}dr$$
$$= \frac{1}{2i}\int_0^\infty e^{(i\kappa-\mu)r} - e^{-(i\kappa+\mu)r}dr$$

Tích phân bình thường

Prob 10.13/p.395

Cho

$$V(r) = \alpha\delta(r-a)$$

(a) Biên độ tán xạ $f(\theta) = ?$, vi phân tiết diện tán xạ $D(\theta) = ?$, và tiết diện tán xạ toàn phần $\sigma = ?$, sử dụng gần đúng xấp xỉ Born với năng lượng thấp.

Giải:

$$f(\theta,\phi) \approx -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}_0}V(\mathbf{r}_0)d\mathbf{r}_0 \qquad (1)$$
$$\approx -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int V(\mathbf{r})d\mathbf{r}, \qquad \text{(năng lượng thấp)} \qquad (2)$$

Thay $V(r)$ vào (2) ta được

$$\begin{aligned}
f(\theta,\phi) &\approx -\frac{\alpha m}{2\pi\hbar^2}\int \delta(\mathbf{r}-a)d\mathbf{r} \\
&= -\frac{\alpha m}{2\pi\hbar^2}\int \delta(r-a)r^2dr\int_0^{2\pi} d\phi\int_0^{\pi}\sin\theta d\theta \\
&= -\frac{\alpha m}{2\pi\hbar^2}4\pi\int \delta(r-a)r^2dr \\
&= -\frac{2\alpha m}{\hbar^2}a^2
\end{aligned}$$

$$D(\theta) = |f|^2; \qquad \sigma = \int D(\theta)\sin\theta d\theta d\phi = 4\pi D$$

(b)

$$\begin{aligned}
f(\theta,\phi) &\approx -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}}V(\mathbf{r})d\mathbf{r} \\
&\approx -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int e^{i\kappa r\cos\theta_0}V(r)r^2\sin\theta_0 dr d\theta_0 d\phi_0 \\
&\approx -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int_0^{2\pi}d\phi_0\int_0^{\infty}r^2V(r)\left[\int_0^{\pi}e^{i\kappa r\cos\theta_0}sin\theta_0 d\theta_0\right]dr \\
&\approx -\frac{m}{2\pi\hbar^2}2\pi\int_0^{\infty}r^2V(r)\frac{2\sin\kappa r}{\kappa r}dr \\
&\approx -\frac{2m}{\kappa\hbar^2}\int_0^{\infty}rV(r)2\sin\kappa r dr = -\frac{2m\alpha}{\kappa\hbar^2}\int_0^{\infty}r\delta(r-a)dr
\end{aligned}$$

(c)

Prob 10.16/p.397

$$\left(\frac{d^2}{dx^2}+k^2\right)G(x) = \delta(x). \tag{1}$$

Hàm Green thỏa phương trình trên, bằng cách lấy biến đổi Fourier cho phương trình (1), ta được

$$G(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int e^{isx}g(s)ds.$$

Thay vào VT của (1)

$$\begin{aligned}
\left(\frac{d^2}{dx^2}+k^2\right)G(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int\left[\left(\frac{d^2}{dx^2}+k^2\right)e^{isx}\right]g(s)ds \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int\left(-s^2+k^2\right)e^{isr}g(s)ds.
\end{aligned}$$

VP của (1)

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int e^{isx}dx.$$

Như vậy ta được

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int\left(-s^2+k^2\right)e^{isr}g(s)ds = \frac{1}{2\pi}\int e^{isx}dx\\
&\Rightarrow g(s) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}(k^2-s^2)}.
\end{aligned}$$

Hàm Green có dạng là

$$G(x) = \frac{1}{2\pi}\int\frac{e^{isx}}{k^2-s^2}ds.$$

(1) Khi $x > 0$:

$$G(x) = -\frac{1}{2\pi}\oint\left(\frac{e^{isx}}{s+k}\right)\frac{1}{s-k}dx = -\frac{1}{2\pi}2\pi i\left(\frac{e^{isx}}{s+k}\right)\Bigg|_{s=k} = -i\frac{e^{ikx}}{2k}.$$

(2) Khi $x < 0$:

$$G(x) = +\frac{1}{2\pi}\oint\left(\frac{e^{isx}}{s-k}\right)\frac{1}{s+k}dx = +\frac{1}{2\pi}2\pi i\left(\frac{e^{isx}}{s-k}\right)\Bigg|_{s=-k} = -i\frac{e^{-ikx}}{2k}.$$

Vậy nghiệm của hàm Green là

$$G(x) = -\frac{i}{2k}e^{ik|x|}.$$

Nghiệm riêng của phương trình Schrödinger là

$$\begin{aligned}
\psi(x)_p &= \int G(x-x_0)\mathcal{Q}(x_0)dx_0 \qquad (Eq10.53)\\
&= -\int\frac{i}{2k}e^{ik|x-x_0|}\mathcal{Q}(x_0)dx_0
\end{aligned}$$

với $\mathcal{Q} = \frac{2m}{\hbar^2}V(x_0)\psi(x_0)$. Nghiệm của của phương trình Schrödinger sẽ là bằng nghiệm riêng cộng với nghiệm của phương trình Schrödinger thuần nhất (ĐPCM)

$$\psi(x) = \psi_0(x) - \int\frac{i}{2k}e^{ik|x-x_0|}\mathcal{Q}(x_0)dx_0$$

1.5 Bài tập David Tong

title