Analytical properties of the transmission coefficients خواص تحلیلی ضرایب ترا گسیل

$E<0 \ , \ |E|<V_0$

یادآوری:

$$\varkappa_B^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2} \qquad V(x) = -V_0\,\theta(a-|x|) \quad \text{(a) چاه پتانسیل}$$

$$q^2 = \frac{2m(V_0-|E|)}{\hbar^2} \qquad V_0>0$$

حالات مقید:

(1) $\dfrac{\varkappa_B}{q} = \operatorname{tg} qa$ با پاریته زوج

(2) $\dfrac{\varkappa_B}{q} = -\operatorname{cotg} qa$ با پاریته فرد

اگر $V_0 \to \infty$

(1) جوابهای زوج: $\longrightarrow E_n \cong -V_0 + \dfrac{(2n+1)^2\pi^2\hbar^2}{8ma^2}$

$q_n a \approx \dfrac{\pi}{2a}(2n+1) \qquad n=0,1,\dots$

(2) جوابهای فرد: $\longrightarrow E_n \simeq -V_0 + \dfrac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$

$q_n a \simeq n\pi \qquad n=1,2,\dots$

بطور کلی: $q_\ell a \simeq \dfrac{(\ell+1)\pi}{2} \ ; \ \ell = 0,1,2,\dots$

جوابهای این حالت ها در بیان با پاریته زوج و فرد دارند برای ℓ های فرد و زوج

$$(q_\ell a)^2 = \frac{2m(V_0-|E|)}{\hbar^2} = \frac{\ell^2\pi^2}{4}$$

$$\longrightarrow \boxed{-|E_\ell| \simeq -V_0 + \frac{\ell^2\pi^2\hbar^2}{8ma^2}} \ ; \ \ell = 0,1,2,\dots$$

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \qquad V(x) = -V_0\,\theta(a-|x|) \quad \text{(b) چاه پتانسیل}$$

$$q^2 = \frac{2m(V_0+E)}{\hbar^2} \qquad V_0>0$$

حالات پراکندگی: $E>0$

ضریب تراگسیل $S(E) = \dfrac{e^{-2ika}}{\cos 2qa - \frac{i}{2}\left(\frac{q}{k}+\frac{k}{q}\right)\sin 2qa}$

$$|S(E)|^2 = \left(1 + \frac{\sin^2 2qa}{4\left(\frac{E}{V_0}\right)\left(1+\frac{E}{V_0}\right)}\right)^{-1} \checkmark$$

$$= \left(\frac{4x(1+x) + \sin^2 2\zeta\sqrt{1+x}}{4x(1+x)}\right)^{-1} \quad \text{with } x \equi \frac{E}{V_0}, \quad \zeta \equiv \frac{a\sqrt{2mV_0}}{\hbar}$$

اگر $\sin 2qa = 0 \rightarrow 2qa = n\pi \Rightarrow |S(E)|^2 = 1 \rightarrow$ Resonance $\left(|R(E)|^2 = 1 - |S(E)|^2 = 0\right)$

$2qa = n\pi$ or $E = E_R$

$$\boxed{E_R = -V_0 + \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{8ma^2} \ ; \ n = 0,1,2,\dots}$$

نتیجه ۱ ← به این ترتیب انرژی رزونانس (تشدید) برای مسئله پراکندگی با انرژی $|E_\ell|$ - حالات مقید در مسئله چاه پتانسیل بسیار عمیق در ارتباط است.

• ارتباط دیگری هم بین روابط مربوط به مسئله پراکندگی و حالات مقید وجود دارد:

به عبارت $S(E)$ توجه می‌کنیم. قطبهای آن را بدست میاوریم (مکانهائی که مخرج ماتریس صفر می‌شود و $S(E)$ بینهایت بزرگ)

$$\cos 2qa = \frac{i}{2}\left(\frac{q}{k}+\frac{k}{q}\right)\sin 2qa$$

$$\cot g\, 2qa = \frac{i}{2}\left(\frac{k}{q}+\frac{q}{k}\right)$$

$$\cancel{\tfrac{1}{2}}\left(\cot g\, qa - tg\, qa\right) = \cancel{\tfrac{i}{2}}\left(\frac{k}{q}+\frac{q}{k}\right) \rightarrow \left(\cot g\, qa - tg\, qa\right) = i\left(\frac{k}{q}+\frac{q}{k}\right)$$

a) $\cot g\, qa = \dfrac{ik}{q}$ •

$$tg\, qa = \frac{1}{\cot g qa} = \frac{1}{\frac{ik}{q}} = -\frac{iq}{k}$$

b) $-tg\, qa = \dfrac{ik}{q} \rightarrow tg\, qa = -\dfrac{ik}{q}$ •

$$\cot g\, qa = \frac{1}{tg qa} = \frac{1}{-\frac{ik}{q}} = +\frac{iq}{k}$$

با یادآوری

$$q^2 = \frac{2m(V_0+E)}{\hbar^2}$$

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

برای اینکه این معادلات درست باشند

(a) q و k نمی‌توانند همزمان حقیقی باشند — $V_0+E>0 \rightarrow E>-V_0$ و $E>0$

(b) q , k نمی‌توانند همزمان مختلط باشند — $V_0+E<0 \rightarrow E<-V_0$, $E<0$

(c) • پس یا q مختلط و k حقیقی (۱)

• یا q حقیقی و k مختلط (۲) $\longrightarrow$

(1) $V_0+E<0 \rightarrow E<-V_0$ و $E>0$ نمی‌شود

(2) $V_0+E>0 \rightarrow E>-V_0$ و $E<0$ or equivalently

$$-V_0<E<0$$

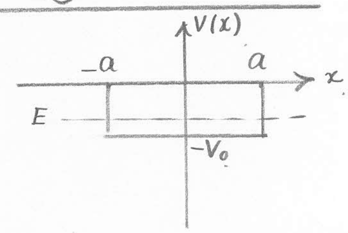
برای k مختلط داریم مثلاً $k = i\kappa_B$

(a) $\cot g\, qa = \dfrac{ik}{q} = \dfrac{-\kappa_B}{q} \longrightarrow$ شرط جوابهای مقید با پاریته فرد !

(b) $tg\, qa = -\dfrac{ik}{q} = \dfrac{\kappa_B}{q} \longrightarrow$ شرط جوابهای مقید با پاریته زوج !

نتیجه ۲: ← ما در واقع به دنبال قطب‌های $S(E)$ (ضریب تراگسیل در مسئله چاه الف بودیم) ولی رسیدیم به اینکه مکان این قطب‌ها (مقدار E برای وقتی مخرج $S(E)$ مساوی صفر می‌شود و در نتیجه $S(E)$ بی‌نهایت بزرگ می‌شود) درست در نقاطی بوده‌اند که حالت‌های مقید با پاریته زوج یا فرد داشتیم.

● نوعی استدلال برای این ارتباط:



در مسئله چاه الف

$$\psi_{in}+\psi_{refl.} = Ae^{ikx}+Be^{-ikx} \qquad x<-a$$

$$\psi_{out} = Fe^{ikx} \qquad x>a$$

$$F = S(E)A$$

$$B = AS(E)\,\frac{i}{2}\left(\frac{q}{k}-\frac{k}{q}\right)\sin 2qa$$

اگر به ψ_{in} توجه کنیم

$$x<-a \qquad \psi_{in} = Ae^{ikx}$$

اگر $ik = -\kappa_B$

شبیه جایگذاری که برای این ارتباط بین قطب‌های $S(E)$ و مکان جواب‌های زوج و فرد داشتیم، آنگاه

$$\psi_{in} \to A\,e^{-\kappa_B x} \xrightarrow[x<-a]{} \infty$$

برای اینکه $\psi_{in}\to\infty$ نشود باید $A\to 0$ برود.

حال به $\psi_{refl.}$ و ψ_{out} توجه می‌کنیم:

$$\psi_{out} = Fe^{ikx}$$

$$\underset{k=+i\kappa_B}{=} AS(E)\,e^{-\kappa_B x}\,, \quad x>a$$

از آنجا که $e^{-\kappa_B x}$ برای xهای مثبت خوش‌رفتار می‌شود، اگر A هم مساوی صفر شود، دیگر ψ_{out} باقی نمی‌ماند! مگر اینکه حاصلضرب $AS(E)$ متناهی و غیرصفر شود. چون A صفر توجیه می‌شود برای اینکه $AS(E)$ محدود بماند باید $S(E)$ ناچاراً ∞ بزرگ شود. این اتفاق بر اساس ساختارمان در نقاط E_B (انرژی حالت‌های مقید زوج و فرد اتفاق می‌افتند).

نتیجه اینکه E_B به مکان قطب $S(E)$ ارتباط دارد، و این را بصورت مستقیم هم دیدیم.

□

بررسی $S(E)$ در نزدیکی نقاط تشدید

دیدیم که تشدید وقتی رخ می دهد که $|S(E)|^2=1$ باشد. با توجه به

$$|S(E)|^2 = \left(1 + \frac{\sin^2 2qa}{4\left(\frac{E}{V_0}\right)\left(1+\frac{E}{V_0}\right)}\right)^{-1}$$

شرط تشدید

$$\longrightarrow \quad \sin 2qa = 0 \rightarrow \boxed{2qa = n\pi \qquad n = 0, 1, \ldots}$$

قبلاً داشتیم $\quad 2qa = n\pi \hookrightarrow \quad E_R = \dfrac{n^2\pi^2\hbar^2}{8ma^2} - V_0$

حال می خواهیم $S(E)$ را در اطراف E_R بسط دهیم و رفتار آن را بررسی کنیم:

$$e^{2ika} S(E) = \frac{1}{\cos 2qa - \frac{i}{2}\left(\frac{q}{k}+\frac{k}{q}\right)\sin 2qa} = \frac{1}{\cos 2qa\left(1 - \frac{i}{2}\left(\frac{q}{k}+\frac{k}{q}\right)\operatorname{tg} 2qa\right)}$$

for $2qa = n\pi \rightarrow \cos 2qa\Big|_{2qa=n\pi} = (-1)^n$

از طرفی

$$f(E) \equiv \frac{1}{2}\left(\frac{q}{k}+\frac{k}{q}\right)\operatorname{tg} 2qa$$

$$E - E_R = \epsilon$$

$$f(E) = f(E_R+\epsilon) = f(E_R) + \epsilon \frac{df(E)}{dE}\Big|_{E=E_R} + \cdots$$
$$= f(E_R) + (E-E_R)\frac{df}{dE}\Big|_{E=E_R} + \cdots$$

a) $f(E_R) = \frac{1}{2}\left(\frac{2qa}{2ka}+\frac{2ka}{2qa}\right)\operatorname{tg} 2qa\Big|_{2qa=n\pi} = 0$ because $\operatorname{tg} 2qa\Big|_{2qa=n\pi} = 0$

b) $\dfrac{df}{dE}\Big|_{\substack{E=E_R \\ \text{or } 2qa=n\pi}} =$

$$= \frac{df(E)}{d(2qa)}\,\frac{d(2qa)}{dE}\Big|_{\substack{E=E_R \\ \text{or} \\ 2qa=n\pi}}$$

$$= \left\{\frac{d}{d(2qa)}\left(\frac{1}{2}\left(\frac{2qa}{2ka}+\frac{2ka}{2qa}\right)\right)\underbrace{\operatorname{tg} \underbrace{2qa}_{=n\pi}}_{=0}\right.$$

$$\left. + \frac{1}{2}\left(\frac{q}{k}+\frac{k}{q}\right)\underbrace{\frac{d}{d(2qa)}\operatorname{tg} 2qa}_{=\frac{1}{\cos^2 2qa}\Big|_{2qa=n\pi}=1}\right\}\frac{d(2qa)}{dE}$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{df}{dE}\Big|_{E=E_R} = \frac{1}{2}\left(\frac{q}{k}+\frac{k}{q}\right)\frac{d(2qa)}{dE}\Big|_{\substack{E=E_R \\ \text{or } 2qa=n\pi}}}$$

نمادگذاری:

$$\left.\frac{df(E)}{dE}\right|_{E=E_R} \equiv \frac{2}{\Gamma}$$

$$\longrightarrow \quad f(E) = f(E_R) + (E-E_R)\left.\frac{df}{dE}\right|_{E_R} + \cdots = \frac{2}{\Gamma}(E-E_R) + \cdots$$

براساس این نمادگذاری بنظر می‌رسد در اطراف انرژی تشدید

$$\boxed{S(E)\,e^{+2ika} \simeq (-1)^n \frac{1}{1 - i\frac{2}{\Gamma}(E-E_R)} = \frac{(-1)^n\, i\Gamma/2}{\frac{i\Gamma}{2} + (E-E_R)}}$$

• از روی همین رابطه کاملاً مشخص است که $S(E)$ در $E = E_R - \frac{i\Gamma}{2}$ قطب دارد و در این نقطه ∞ بزرگ می‌شود

نکته: • با توجه به $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ ، $q = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}$ در مسئله چاه گذشته

$$\boxed{\frac{2}{\Gamma} = \frac{1}{2}\,\frac{\sqrt{2m}\,a}{\hbar}\,\frac{2E_R+V_0}{\sqrt{E_R(E_R+V_0)}}}$$

اگر $V_0 \gg E_R$ یا $E_R/V_0 \ll 1$

$$\frac{2}{\Gamma} = \frac{1}{2}\,\frac{\sqrt{2m}\,a}{\hbar}\,\frac{(1+2E_R/V_0)}{\sqrt{E_R}\left(1+\frac{E_R}{V_0}\right)} \approx \frac{1}{2}\,\frac{\sqrt{2m}\,a}{\hbar}\,\frac{1}{\sqrt{E_R}} = \sqrt{\frac{m}{2E_R}}\,\frac{a}{\hbar}$$

با توجه به $E_R = \frac{1}{2} m v_R^2 \longrightarrow \sqrt{\frac{2E_R}{m}} = v_R$ سرعت ذره در محل تشدید

$$\frac{2}{\Gamma} \sim \frac{a}{\hbar v_R}$$

نکته: با توجه به تعریف $S(E)$ برحسب $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ ، $q = \frac{\sqrt{2m(V_0+E)}}{\hbar}$ ، $S(E)$ تابع $\sqrt{E}$ است و $\sqrt{E}$ در امتداد محور حقیقی اصطلاحاً branch cut دارد.

اگر $0 < E = |E| \longrightarrow \sqrt{E} = |E|^{1/2}$

$$0 < E = \underbrace{|E|\,e^{2\pi i}} \longrightarrow \sqrt{E} = |E|^{1/2} e^{\pi i} = |E|^{1/2}(\underbrace{\cos\pi}_{=-1} + i\underbrace{\sin\pi}_{0}) = -|E|^{1/2}$$

analytical continuation

into the 2nd Riemannian sheet

سؤال این است که این branch cut خودش را چگونه نشان می‌دهد؟

← قطبهای $S(E)$ که به نقاط تشدید مربوط می‌شوند و در $E = E_R - \frac{i\Gamma}{2}$ ظاهر می‌شوند بر روی second Riemannian sheet قرار دارند.

• یادآوری: وقتی $ReE < 0$ بود (مسئله حالت مقید) در نقاط E_b حالتهای مقید وجود داشتند. برای n های بزرگ

$$\underset{\text{boundstate}}{E_b} = -|E_b| = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{8ma^2} - V_0$$

در پتانسیل ∞ عمیق

از طرفی دیدیم که

$$E_b = E_R = \underbrace{\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{8ma^2} - V_0}_{>0}$$

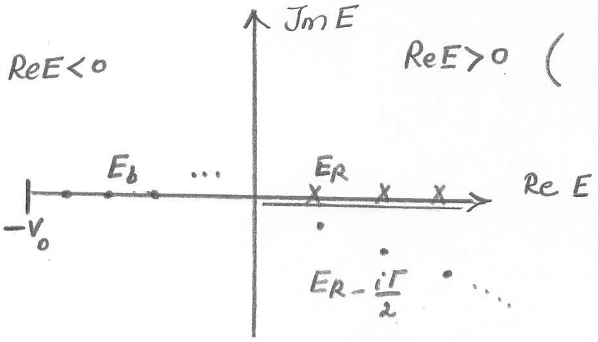
برای مسئله پراکندگی E_R انرژی تشدید بود یعنی مقداری از E که در آن $|S(E)|^2=1$ می‌شد و $|R(E)|^2=0$

ولی تابع $S(E)$ قطبهایی هم دارد در نقاط $E_R - \frac{i\Gamma}{2}$ که در آن در تقریب مرتبه اول

$$\frac{2}{\Gamma} = \frac{1}{2}\,\frac{\sqrt{2m}\,a}{\hbar}\,\frac{2E_R+V_0}{\sqrt{E_R}\,(E_R+V_0)}$$

اگر در صفحه مختلط رسم کنیم:

(مسئله حالت مقید) $ReE<0$



برای $E>0$ ← branch cut داریم

✓ بر روی 1st Riemannian sheet $S(E)$ قطبهایی دارد درست در برمکان انرژی حالت مقید (برای n های بزرگ). در این قطبها تشدید رخ می‌دهد به این معنی که $|S(E)|^2=1$ می‌شود (که max این احتمال است)

✓ ولی خود $S(E)$ قطبهایی هم در 2nd Riemannian sheets دارد. به ازای هر E_R تعیین شده، قطبی در $E_R - \frac{i\Gamma}{2}$ ظاهر می‌شود که به ازای آن $S(E) \to \infty$ می‌شود.

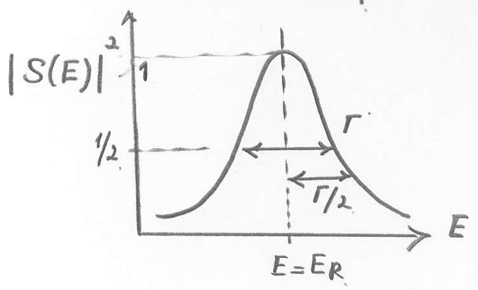
✓ ما بجای اینکه E_R را تعیین کنیم می‌توانیم ببینیم $S(E)$ در کجا ∞ بزرگ می‌شود، می‌دانیم که اینجا در نقطه $E_R - \frac{i\Gamma}{2}$ در 2nd Riemannian sheet هستیم. به ازای هر یک نقطه این چنینی می‌دانیم که $|S(E_R)|^2=1$ و E_R روی محور حقیقی انتخاب شده است.

• حال دوباره فرض کنید که E حقیقی است.

$$e^{2ika}\, S(E) = (-1)^n \frac{i\Gamma/2}{E - E_R + \frac{i\Gamma}{2}} \longrightarrow |S(E)|^2 = \frac{\Gamma^2/4}{(E-E_R)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}}$$

Lorentz curve or

Breit - Wigner function



E_R مرکز

$\Gamma/2$ نصف پهنا نصف دامنه

1 دامنه

Γ پهنای طیفی Spectral width

ولی خود $S(E)$ مختلط است. پس می‌توان آن را به صورت یک اندازه و یک فاز نوشت:

$$S(E) = \underbrace{|S(E)|}_{\text{دامنه (حقیقی)}} \exp\big(-2ika + i\underbrace{\delta(E)}_{\text{فاز}}\big)$$

$$\mathrm{Re}\left(S(E)e^{2ika}\right) = |S(E)| \cos\delta(E)$$

$$\mathrm{Im}\left(S(E)e^{2ika}\right) = |S(E)| \sin\delta(E)$$

$$\mathrm{tg}\,\delta(E) = \frac{\mathrm{Im}\left(S(E)e^{2ika}\right)}{\mathrm{Re}\left(S(E)e^{2ika}\right)}$$

از قبل داشتیم:

$$e^{2ika}\, S(E) = \frac{1}{\cos 2qa\left(1 - \frac{i\epsilon}{2}\mathrm{tg}\,2qa\right)}$$

$$= \frac{1 + \frac{i\epsilon}{2}\mathrm{tg}\,2qa}{\cos 2qa\left(1 - \frac{\epsilon^2}{4}\mathrm{tg}^2 2qa\right)}$$

$\longrightarrow$

$$\mathrm{Re}\left(e^{2ika} S(E)\right) = \frac{1}{\cos 2qa\left(1 - \frac{\epsilon^2}{4}\mathrm{tg}^2 2qa\right)}$$

$$\mathrm{Im}\left(e^{2ika} S(E)\right) = \frac{\epsilon/2\ \mathrm{tg}\,2qa}{\cos 2qa\left(1 - \frac{\epsilon^2}{4}\mathrm{tg}^2 2qa\right)}$$

$$\mathrm{tg}\,\delta(E) = \frac{\epsilon}{2}\mathrm{tg}\,2qa = \frac{1}{2}\left(\frac{q}{k} + \frac{k}{q}\right)\mathrm{tg}\,2qa \underset{\text{قبلاً دیده بودیم}}{=} \frac{2}{\Gamma}(E - E_R) + \cdots$$

$$\text{Near Resonance} \longrightarrow \boxed{\delta(E) = \operatorname{arctg}\left(\frac{2}{\Gamma}(E-E_R)\right)}$$

$$\operatorname{tg}\delta(E) = \frac{2}{\Gamma}(E-E_R)$$

• $\delta(E)$ در واقع زاویه‌ای است که phase shift (اختلاف فاز) بین تابع موج تراگسیل شده را نسبت به تابع موج فرودی می‌دهد.

$$\psi_{in} = A e^{ikx} \qquad x < -a$$

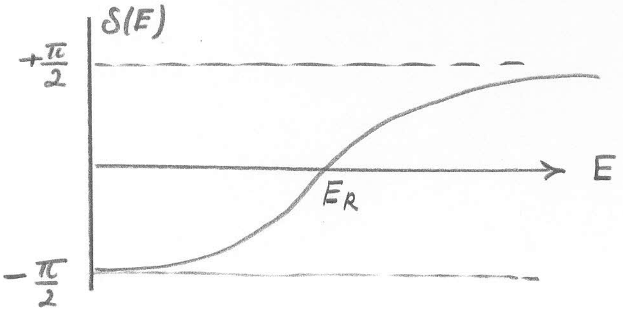
$$\psi_{out} = \psi_{trans} = F e^{ikx} = A S(E) e^{ikx} \qquad x > a$$

$$\psi_{in}(-a) = A e^{-ika} \rightarrow A = e^{ika}\psi_{in}(-a) \qquad (*)$$

$$\psi_{out}(a) = A S(E) e^{ika} \overset{(*)}{=} S(E) e^{2ika}\psi_{in}(-a)$$

$$\boxed{\psi_{out}(a) = |S(E)|\, e^{i\delta(E)}\, \psi_{in}(-a)}$$

اختلاف فاز بین $\psi_{out}(a)$, $\psi_{in}(-a)$



وقتی $E = E_R$ می‌شود

$$\delta(E_R) = \operatorname{arctg} 0 = 0$$