• پتانسیل‌های مرکزی (خلاصه مطالب بخش ۱۷ کتاب Schwabl 1)

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}_x^{\,2}+V(\vec{x})\right)\psi(\vec{x})=E\,\psi(\vec{x})$$

معادله ویژه مقداری انرژی

(شرودینگر غیر وابسته به زمان)

پتانسیل مرکزی

$r=|\vec{x}|\ ,\ V(r)$ ← معادله ویژه مقداری در دستگاه کروی:

$$\longrightarrow\quad\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{\vec{L}^2}{2mr^2}+V(r)\right)\psi(r,\theta,\varphi)=E\,\psi(r,\theta,\varphi)$$

$\psi(r,\theta,\varphi)=Y_{lm}(\theta,\varphi)\,R_{nl}(r)$ ← جایگزین می‌کنیم ψ را با

که در آن Y_{lm} ، $\vec{L}^2\,Y_{lm}(\theta,\varphi)=\hbar^2 l(l+1)\,Y_{lm}(\theta,\varphi)$

$$\longrightarrow$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}+V(r)\right]R_{nl}(r)\,Y_{lm}(\theta,\varphi)=E_n\,R_{nl}(r)\,Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

معادله شعاعی

$$\longrightarrow\quad\boxed{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}+V(r)\right]R_{nl}(r)=E_n\,R_{nl}(r)}$$

• یک پیشنهاد مفید: $R(r)=\frac{u(r)}{r}$

$$(A)\qquad\boxed{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2}+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}+V(r)\right)u(r)=E\,u(r)}$$

• در اینجا استفاده شده است از:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)\frac{u(r)}{r}=\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}u(r)$$

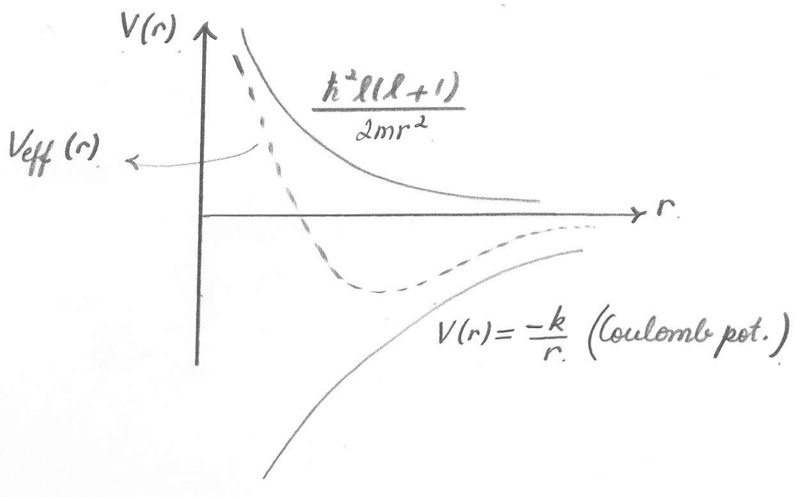
✓ اهمیت رابطه (A) در این است که

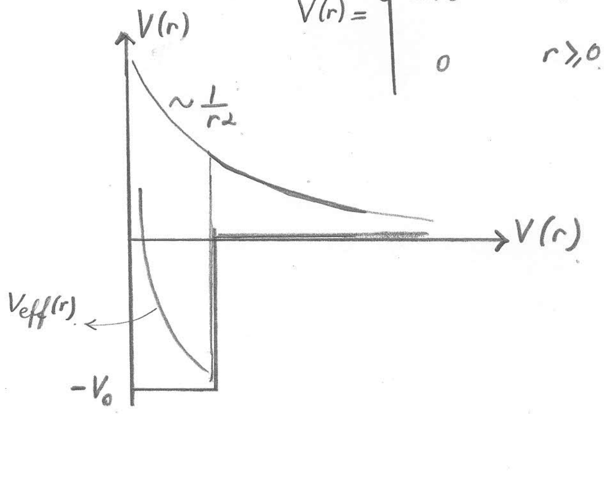
از ترکیب $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$ و $V(r)$ (مخصوصاً اگر $V(r)\sim\frac{-1}{r}$ باشد) می‌توان

یک پتانسیل موثر ساخت V_{eff} که می‌تواند تحت شرایطی حالات مقید را بدهد (مانند مسئله کپلر!)

$$V_{eff}=\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}+V(r)$$

$$V(r)=\begin{cases}-V_0 & r<a\\ 0 & r\geq 0\end{cases}$$





الف) ذره آزاد :

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right)R(r)=ER(r)$$

که پتانسیل گریز از مرکز مانند سد پتانسیل.

Use: $\dfrac{2mE}{\hbar^2}\equiv k^2 \longrightarrow$

$$\boxed{\left(\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right)R(r)=-k^2R(r)}$$

تغییر متغیر: $\rho=kr$ ، $u(r)=\dfrac{R(r)}{r}$

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2}-\frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}+1\right)u_\ell(\rho)=0$$

1) For $\ell=1$ $\curvearrowright$ $\left(\dfrac{d^2}{d\rho^2}+1\right)u_0(\rho)=0$

جواب منظم: $u_0(\rho)=\sin\rho\xrightarrow[\rho\to 0]{}0 \Longrightarrow R_0(\rho)=\dfrac{\sin\rho}{\rho}\xrightarrow[\rho\to 0]{}1$

جواب نامنظم: $u_0(\rho)=-\cos\rho\xrightarrow[\rho\to 0]{}-1 \Longrightarrow R_0(\rho)=-\dfrac{\cos\rho}{\rho}\xrightarrow[\rho\to 0]{}\infty$

2) For $\ell\neq 0$ $\curvearrowright$

پیشنهاد جواب: $R_\ell(\rho)=\rho^\ell\chi_\ell(\rho)$

$$\Rightarrow\left(\frac{d^2}{d\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{d}{d\rho}-\frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}+1\right)R_\ell(\rho)=0\Longrightarrow$$

$$\boxed{\rho^\ell\left(\chi_\ell''(\rho)+\frac{2(\ell+1)}{\rho}\chi_\ell'(\rho)+\chi_\ell(\rho)\right)=0}\qquad(*)$$

سؤال: اگر معادله‌ای که $\chi_\ell(\rho)$ ارضا می‌کند، معادله بالا باشد، می‌خواهیم ببینیم که معادله‌ای که $\chi_{\ell+1}(\rho)$ در آن صدق می‌شود کدام است؟ با پاسخ به این سؤال به یک معادلهٔ بازگشتی برای $\chi_\ell(\rho)$ می‌رسیم:

پس از معادلهٔ $(*)$ نسبت به ρ مشتق می‌گیریم و می‌رسیم به:

$$\boxed{(\chi_\ell')''+\frac{2(\ell+1)}{\rho}(\chi_\ell')'-\frac{2(\ell+1)}{\rho^2}\chi_\ell'+\chi_\ell'=0}$$

Ansatz: $\chi_{\ell+1}=\dfrac{1}{\rho}\chi_\ell'$

$$(\rho\chi_{\ell+1})''+\frac{2(\ell+1)}{\rho}(\rho\chi_{\ell+1})'-\frac{2(\ell+1)}{\rho^2}(\rho\chi_{\ell+1})+(\rho\chi_{\ell+1})=0$$

Use: $(\rho\chi_{\ell+1})'=\chi_{\ell+1}+\rho\chi_{\ell+1}'$

$(\rho\chi_{\ell+1})''=2\chi_{\ell+1}'+\rho\chi_{\ell+1}''$

$$\boxed{\chi_{\ell+1}'' + \frac{2(\ell+2)}{\rho}\chi_{\ell+1}' + \chi_{\ell+1} = 0} \quad (**)$$

حال این معادله را می‌توان با معادله $\chi_\ell'' + \frac{2(\ell+1)}{\rho}\chi_\ell' + \chi_\ell(\rho) = 0$ مقایسه کرد

به این ترتیب $(**)$ همان معادلهٔ $(*)$ است به ازای $\ell+1$:

نتیجه اینکه:

$$\left.\begin{aligned} \chi_{\ell+1}(\rho) &= \frac{1}{\rho}\frac{d\chi_\ell(\rho)}{d\rho} \\ \chi_\ell(\rho) &= \frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\chi_{\ell-1} \end{aligned}\right\} , \longrightarrow \chi_{\ell+1}(\rho) = \frac{1}{\rho}\left(\frac{d}{d\rho}\right)^2 \chi_{\ell-1}$$

و غیره تا

$$\boxed{\chi_\ell(\rho) = \left(\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right)^\ell \chi_0(\rho)}$$

که البته

$$\chi_0(\rho) = R_0(\rho) = \begin{cases} \dfrac{\sin\rho}{\rho} \\[2mm] -\dfrac{\cos\rho}{\rho} \end{cases}$$

$$\rightarrow \text{For} \quad R_\ell(\rho) = \rho^\ell \chi_\ell(\rho) = \begin{cases} \rho^\ell \left(\dfrac{1}{\rho}\dfrac{d}{d\rho}\right)^\ell \dfrac{\sin\rho}{\rho} \quad \text{or} \\[2mm] -\rho^\ell \left(\dfrac{1}{\rho}\dfrac{d}{d\rho}\right)^\ell \dfrac{\cos\rho}{\rho} \end{cases}$$

تابع Bessel کروی (Spherical Bessel function) $\quad j_\ell(\rho) = (-1)^\ell \rho^\ell \left(\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right)^\ell \frac{\sin\rho}{\rho}$

تابع Neumann کروی (Spherical Neumann function) $\quad n_\ell(\rho) = (-1)^\ell (-\rho)^\ell \left(\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right)^\ell \frac{\cos\rho}{\rho}$

For $\rho \gg \ell$

$$j_\ell(\rho) \approx \frac{1}{\rho}\sin\left(\rho - \frac{\ell\pi}{2}\right)$$

$$n_\ell(\rho) \approx -\frac{1}{\rho}\cos\left(\rho - \frac{\ell\pi}{2}\right)$$

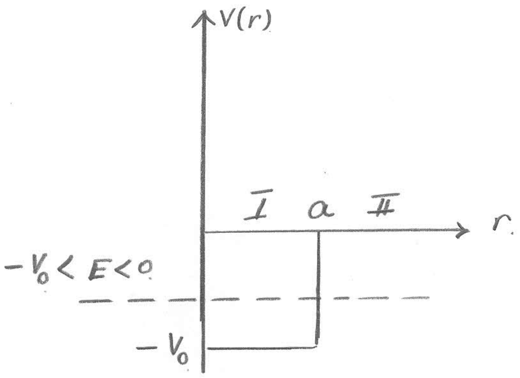
$$\rho = kr \ , \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \qquad E > 0$$

<u>Spherical Hankel:</u>

$$h_\ell^{(1)}(\rho) = j_\ell(\rho) + i n_\ell(\rho) \qquad h_\ell^{(1)}(\rho) \xrightarrow[\rho\to\infty]{} \frac{-i}{\rho} e^{i\left(\rho - \frac{\ell\pi}{2}\right)}$$

$$h_\ell^{(2)}(\rho) = \left(h_\ell^{(1)}(\rho)\right)^*$$

حالات مقید در چاه پتانسیل با تقارن کروی:



$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & 0<r<a \\ 0 & r>a \end{cases}$$

$$(I)\quad \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + q^2\right) R_\ell(r) = 0$$

$$(II)\quad \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - \varkappa^2\right) R_\ell(r) = 0$$

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

$$\varkappa = \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}$$

در منطقه II ذره آزاد است اگر $\varkappa$ را با k در مسئله ذره آزاد مقایسه کنیم، به علت اینکه در این مثال $E<0$ است

$$-k^2 = \varkappa^2 \longrightarrow \qquad k = i\varkappa$$

پیشنهاد جواب:

$$\boxed{\begin{aligned} R_\ell^{I}(\rho) &= A\, j_\ell(\rho = qr) \qquad \text{for} \quad 0 \le r \le a \\ R_\ell^{II}(\rho) &= B\, h_\ell^{(1)}(i\varkappa r) \\ &= B\left(j_\ell(i\varkappa r) + i n_\ell(i\varkappa r)\right) \end{aligned}}$$

(فقط جواب منظم در منطقه I)

(در منطقه II ترکیب خطی از دو جواب منظم و غیر منظم را داریم):

با توجه به

$$h_\ell^{(1)}(kr) \underset{r\to\infty}{=} \frac{-i}{kr} e^{i\left(kr - \frac{\ell\pi}{2}\right)} \underset{k=i\varkappa}{=} \frac{-i}{i\varkappa r} e^{i\left(i\varkappa r - \frac{\ell\pi}{2}\right)} \underset{\substack{\ell=0 \\ \text{s-wave.}}}{\sim} e^{-\varkappa r} \xrightarrow[r\to\infty]{} 0 \quad \underline{\text{ok}}$$

انتخاب $h_\ell^{(1)}(i\varkappa r)$ به علت رفتار این تابع در حد $r\to\infty$ است.

شرایط مرزی در $r=a$

$$A\, j_\ell(qa) = B\, h_\ell^{(1)}(i\varkappa a)$$

$$qA\left(j_\ell(qa)\right)' = B\, i\varkappa \left(h_\ell^{(1)}(i\varkappa a)\right)'$$

$$\left(j_\ell(\rho = qa)\right)' \equiv \frac{d}{d\rho} j_\ell(\rho) \equiv j_\ell'(qa)$$

$$\to \quad q\,\frac{j_\ell'(qa)}{j_\ell(qa)} = i\varkappa\,\frac{\left(h_\ell^{(1)}(i\varkappa a)\right)'}{h_\ell^{(1)}(i\varkappa a)}$$

$$\boxed{q\,\frac{d}{d\rho}\ln j_\ell(\rho)\Big|_{\rho=qa} = i\varkappa\,\frac{d}{d\rho}\ln h_\ell^{(1)}(\rho)\Big|_{\rho=i\varkappa a}}$$

S_wave :

$$q \frac{d}{d\rho} \ln j_0(\rho)\Big|_{\rho=qa} = i\kappa \frac{d}{d\rho} \ln h_0^{(1)}(\rho)\Big|_{\rho=i\kappa a}$$

$$j_0 = \frac{\sin \rho}{\rho}$$

$$h_0^{(1)} = -\frac{ie^{i\rho}}{\rho}$$

LHS: $$\frac{q\rho}{\sin\rho}\left(\frac{\cos\rho}{\rho} - \frac{\sin\rho}{\rho^2}\right)\Big|_{\rho=qa} = q\left(\operatorname{cotg}\rho - \frac{1}{\rho}\right)\Big|_{\rho=qa} = q\operatorname{cotg}(qa) - \frac{1}{a}$$

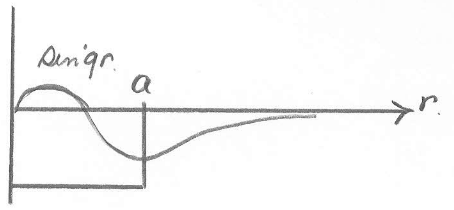
RHS: $$\frac{-i\kappa\rho}{i e^{-\kappa a}}(-i)\left(i\frac{e^{i\rho}}{\rho} - \frac{e^{i\rho}}{\rho^2}\right)\Big|_{\rho=i\kappa a} = -\kappa e^{+\kappa a}\left(e^{-\kappa a} + i\frac{e^{-\kappa a}}{i\kappa a}\right) =$$

$$= -\kappa - \frac{1}{a}$$

$\longrightarrow$ شرط مورد نظر $\Longrightarrow$ $$q \operatorname{cotg} qa - \frac{1}{a} = -\kappa - \frac{1}{a}$$

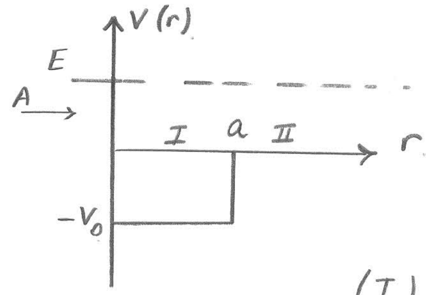
$$\boxed{\operatorname{cotg} qa = \frac{-\kappa}{q}}$$

این معادله همان جواب های مقید با پاریته فرد برای چاه پتانسیل متناهی را می دهد.



مکانیک کوانتومی ۳ ـ صفحه ۷۱ ـ آبان ۱۳۹۷

جواب‌های پیوستار (حالت پراکندگی) $E>0$ برای جعبه پتانسیل:



$$(\mathrm{I})\quad \left(\frac{-\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right)+\frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2mr^2}-V_0\right)R_\ell(r)=E R_\ell(r)$$

$$(\mathrm{I})\quad \left(\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}+\frac{2m(V_0+E)}{\hbar^2}\right)R_\ell^{\mathrm{I}}(r)=0 \qquad \text{for } V_0\neq 0$$

$$(\mathrm{II})\quad \left(\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}+\frac{2mE}{\hbar^2}\right)R_\ell^{\mathrm{II}}(r)=0 \qquad \text{for } V_0=0$$

Ansatz:

$0<r<a \qquad R_\ell^{\mathrm{I}}(qr)=A j_\ell(qr)$ جواب منظم

$r>a \qquad B j_\ell(kr)+C n_\ell(kr)=R_\ell^{\mathrm{II}}(kr)$

for $q=\dfrac{\sqrt{2m(V_0+E)}}{\hbar}$

$k=\dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

شرایط مرزی :

$$q\,\frac{1}{j_\ell(\rho)}\frac{d}{d\rho}j_\ell(\rho)\Big|_{\rho=qa}=k\left(\frac{B\frac{dj_\ell(\rho)}{d\rho}+C\frac{dn_\ell(\rho)}{d\rho}}{Bj_\ell(\rho)+Cn_\ell(\rho)}\right)_{\rho=ka}$$

$$j_\ell(\rho)\xrightarrow[\rho\to\infty]{}\frac{1}{\rho}\sin\left(\rho-\frac{\ell\pi}{2}\right) \qquad \rho\to\infty \text{ or } \rho\gg\ell \text{ در حد}$$

$$n_\ell(\rho)\xrightarrow[\rho\to\infty]{}-\frac{1}{\rho}\cos\left(\rho-\frac{\ell\pi}{2}\right)$$

$$R_\ell^{\mathrm{II}}(kr)=Bj_\ell(kr)+Cn_\ell(kr)\underset{\rho\to\infty}{\cong}\left[\frac{B}{\rho}\sin\left(\rho-\frac{\ell\pi}{2}\right)+\frac{C}{\rho}(-1)\cos\left(\rho-\frac{\ell\pi}{2}\right)\right]_{\rho=kr}$$

$$=\frac{B}{kr}\left(\sin\left(\rho-\frac{\ell\pi}{2}\right)-\frac{C}{B}\cos\left(\rho-\frac{\ell\pi}{2}\right)\right)_{\rho=kr}$$

نامگذاری $\quad \dfrac{C}{B}\equiv-\operatorname{tg}\delta_\ell(k)=-\dfrac{\sin\delta_\ell}{\cos\delta_\ell}$

$$\hookrightarrow R_\ell^{\mathrm{II}}(kr)=\frac{B}{kr}\left(\sin\left(\rho-\frac{\ell\pi}{2}\right)+\frac{\sin\delta_\ell}{\cos\delta_\ell}\cos\left(\rho-\frac{\ell\pi}{2}\right)\right)_{\rho=kr}$$

$$=\frac{B}{kr}\left(\cos\delta_\ell\sin\left(\rho-\frac{\ell\pi}{2}\right)+\sin\delta_\ell\cos\left(\rho-\frac{\ell\pi}{2}\right)\right)_{\rho=kr}\frac{1}{\cos\delta_\ell}$$

$$\sin\left(\rho-\frac{\ell\pi}{2}+\delta_\ell\right)$$

$$\boxed{R_\ell^{\mathrm{II}}(kr)=\frac{B}{kr\cos\delta_\ell}\sin\left(\rho-\frac{\ell\pi}{2}+\delta_\ell\right) \quad \text{with } \delta_\ell=\operatorname{artg}\left(-\frac{C}{B}\right)}$$

این یک تابع موج کروی با اختلاف فاز (phase shift) است.

محاسبه $\delta_l(k)$ برای $l=0$ ؟

$$q\,\frac{dj_0(qa)/d\rho}{j_0(qa)} = k\left(\frac{B\frac{d}{d\rho}j_0(\rho)+C\frac{d}{d\rho}n_0(\rho)}{B\,j_0(\rho)+C\,n_0(\rho)}\right)_{\rho=ka} \quad ; \quad j_0(\rho)=\frac{\sin\rho}{\rho}, \quad n_0(\rho)=-\frac{\cos\rho}{\rho}$$

طرف چپ :

$$\frac{q}{\frac{\sin\rho}{\rho}}\left(\frac{\cos\rho}{\rho}-\frac{\sin\rho}{\rho^2}\right)=q\left(\cot g\rho-\frac{1}{\rho}\right)\Big|_{\rho=qa}=q\cot g\,qa-\frac{1}{a}$$

طرف راست

$$k\,\frac{B\left(\frac{\cos\rho}{\rho}-\frac{\sin\rho}{\rho^2}\right)+C\left(\frac{\sin\rho}{\rho}+\frac{\cos\rho}{\rho^2}\right)}{B\frac{\sin\rho}{\rho}-C\frac{\cos\rho}{\rho}}\Bigg|_{\rho=ka}$$

$$=k\,\frac{\frac{B\cos\rho+C\sin\rho}{\rho}+\frac{-B\sin\rho+C\cos\rho}{\rho^2}}{\frac{B\sin\rho-C\cos\rho}{\rho}}\Bigg|_{\rho=ka}$$

$$=k\left(\frac{B\cos\rho+C\sin\rho}{B\sin\rho-C\cos\rho}-\frac{1}{\rho}\right)_{\rho=ka}$$

$$=\frac{kB}{B}\left(\frac{\cos\rho+\frac{C}{B}\sin\rho}{\sin\rho-\frac{C}{B}\cos\rho}-\frac{1}{\rho}\right)_{\rho=ka}=k\left(\frac{\cos\rho-tg\delta_0\sin\rho}{\sin\rho+tg\delta_0\cos\rho}-\frac{1}{\rho}\right)_{\rho=ka}$$

$$-\frac{C}{B}=tg\delta_0$$

$$=k\left(\frac{\cos(\rho+\delta_0)}{\sin(\rho+\delta_0)}-\frac{1}{\rho}\right)_{\rho=ka}=k\left(\cot g(\rho+\delta_0)-\frac{1}{\rho}\right)_{\rho=ka}$$

مقایسه دو طرف

$$q\cot g\,qa-\frac{1}{a}=k\cot g(ka+\delta_0)-\frac{1}{a}$$

$$\hookrightarrow\ \frac{k}{q}\,tg\,qa=tg(ka+\delta_0)$$

$$\boxed{\delta_0=\operatorname{arctg}\left(\frac{k}{q}\,tg\,qa\right)-ka}$$