

Chapter Eleven

معادله شعاعی

Radial Equation

معادله شعاعی به شکل زیر است:

$$\left[\frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \frac{d^2}{dr^2} \right] R_{nlm}(r) - \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right] R_{nlm}(r) + \frac{2\mu E}{\hbar^2} R_{nlm}(r) = 0$$

که می توان آن را با استفاده از اطلاعات ارایه شده در فصلهای نه و ده و یازده به صورت زیر به دست آورد:

$$H u_E(\mathbf{r}) = E u_E(\mathbf{r})$$

$$H = \frac{p^2}{2\mu} + V(\mathbf{r})$$

$$p^2 = \frac{1}{r^2} L^2 - \hbar^2 \frac{1}{r^2} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right)^2 - \hbar^2 \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{r^2} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{\hbar^2 r^2} L^2 \right] + V(\mathbf{r})$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{r^2} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{\hbar^2 r^2} L^2 \right] u_E(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) u_E(\mathbf{r}) = E u_E(\mathbf{r})$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{\hbar^2 r^2} L^2 \right] u_E(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) u_E(\mathbf{r}) = E u_E(\mathbf{r})$$

$$u_E(\mathbf{r}) = Y_{lm}(\theta, \varphi) R(r)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\nabla_r^2 - \frac{1}{\hbar^2 r^2} L^2 \right] u_E(\mathbf{r}) + V(r)u_E(\mathbf{r}) = Eu_E(\mathbf{r})$$

$$u_E(\mathbf{r}) = Y_{lm}(\theta, \varphi)R(r)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[Y_{lm}(\theta, \varphi) \nabla_r^2 R_{Elm}(r) - R_{Elm}(r) \frac{1}{\hbar^2 r^2} \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta, \varphi) \right] + V(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) R_{Elm}(r) = E Y_{lm}(\theta, \varphi) R_{Elm}(r)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\nabla_r^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_{Elm}(r) + V(r) R_{Elm}(r) = E R_{Elm}(r)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_{Elm}(r) + V(r) R_{Elm}(r) = E R_{Elm}(r)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_{Elm}(r) + V(r) R_{Elm}(r) = E R_{Elm}(r)$$

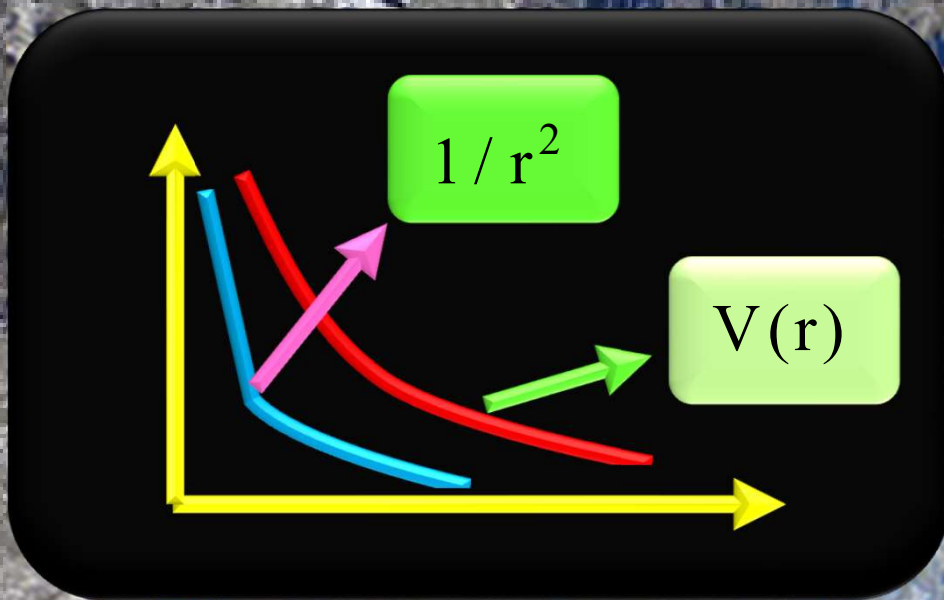
معادله شعاعی را به شکل زیر باز نوی می کنیم:

$$\left[\frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \frac{d^2}{dr^2} \right] R_{nlm}(r) - \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right] R_{nlm}(r) + \frac{2\mu E}{\hbar^2} R_{nlm}(r) = 0$$

که در آن طرفین رابطه قبل را در $2\mu/\hbar^2$ ضرب کرده و آن را مرتب کرده ایم و به جای اندیس E هم اندیس n استفاده کرده ایم: $R_{nlm}(r)$

ما جوابهای معادله فوق را به ازای پتانسیلهای مختلفی مورد بررسی قرار می دهیم:

تمام این پتانسیلها این شرط را دارند که سریعتر از $1/r^2$ در بینهایت به سمت صفر میل می کنند، بجز حالت خاص پتانسیا کولمبی:



اگر $V(r)$ آرام به سمت صفر میل کند آنگاه در نواحی ای که $1/r^2$ وجود ندارد اثر عدد کوانتومی l یعنی $l(l+1)/r^2$ ظاهر نخواهد شد و این مطلوب ما در مکانیک کوانتومی نیست. پس در حد r های خیلی بزرگ جمله کوانتومی فوق اهمیت دارد.

$$\lim_{r \rightarrow 0} r^2 V(r) = 0$$

ما همچنین فرض می کنیم که پتانسیل در مبداء تکینگی ای از نوع $1/r^2$ نداشته باشد، یعنی تحقیق کنیم که:

اگر $V(r)$ تکینگی ای از نوع $1/r^2$ داشته باشد، آنگاه در $r \rightarrow 0$ از $V(r)$ در مقابل $l(l+1)/r^2$ نمی توان صرف نظر کرد. فلذا بررسی حالت مجانبی دشوار خواهد شد.

$$u_{nlm}(r) = rR_{nlm}(r)$$

برخی از اوقات معرفی یک تابع به شکل روبه رو مفید به نظر می رسد:

$$\left[\frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \frac{d^2}{dr^2} \right] \frac{u_{nlm}(r)}{r} = \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} u_{nlm}(r)$$

چون:

که از آنجا نتیجه می شود که:

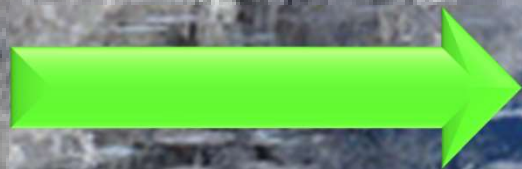
$$\left[\frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \frac{d^2}{dr^2} \right] R_{nlm}(r) - \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right] R_{Elm}(r) + \frac{2\mu E}{\hbar^2} R_{Elm}(r) = 0$$

$$\frac{d^2 u_{nlm}(r)}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E - V(r) - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right] u_{Elm}(r) = 0$$

تمرین: رابطه بالا را به دست آورید:

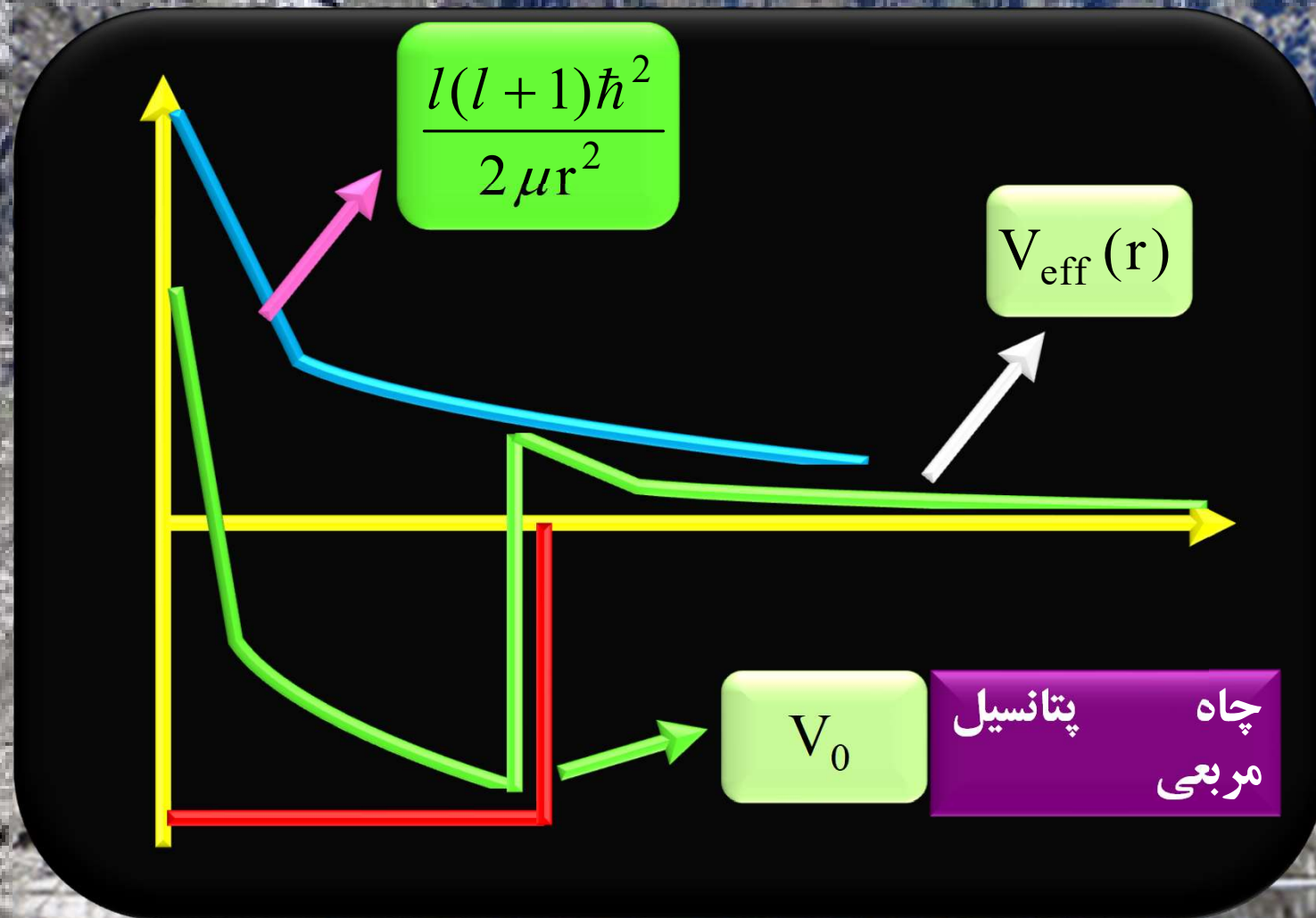
الف) معادله فوق بسیار شبیه معادله یک تک ذره یک بعدی است با این تفاوت که:

$V(r)$



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

که این جمله کوانتومی مانند مکانیک کلاسیک در نیروی جانب مرکز ناشی از تغییر دستگاه مختصات است.



$$V(r) = V_0$$

چاه
مربعی

پتانسیل

$$V_{\text{eff}}(r) = V_0 + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}$$

چاه
مربعی

پتانسیل

V_0

$$u_{nlm}(r) = rR_{nlm}(r)$$

$$u_{Elm}(0) = 0$$

ب) متناهی بودن تابع موج ایجاب می کند که:

که سبب می شود که لا بسیار شبیه تابع موج یک تک ذره یک بعدی در یک چاه باشد که در طرف چپ پتانسیل به سمت بینهایت میل کرده باشد.

ابتدا معادله شعاعی را نزدیک مبدا در نظر می گیریم:

$$\frac{d^2 u_{nlm}(r)}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E - V(r) - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right] u_{Elm}(r) = 0$$

$$r \rightarrow 0$$



$$\frac{d^2 u_{nlm}(r)}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} u_{Elm}(r) \approx 0$$

$$u_{Elm}(r) \sim r^s$$

$$u_{Elm}(r) \sim r^s$$

$$\frac{d^2 u_{nlm}(r)}{dr^2}$$



$$s(s-1)r^{s-2}$$

$$\frac{l(l+1)}{r^2} u_{Elm}(r)$$



$$\frac{l(l+1)}{r^2} r^s = l(l+1)r^{s-2}$$

$$\frac{d^2 u_{nlm}(r)}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} u_{Elm}(r) \approx 0$$

$$s(s-1)r^{s-2} = l(l+1)r^{s-2}$$

$$s(s-1) = l(l+1)$$

$$s(s-1) = l(l+1)$$

$$s = l + 1$$

$$\begin{aligned} s(s-1) &= (l+1)l \\ &= l(l+1) \end{aligned}$$

$$s = -l$$

$$\begin{aligned} s(s-1) &= -l(-l-1) \\ &= l(l+1) \end{aligned}$$

$$s = l + 1$$

$$u \sim r^{l+1}$$

$$\lim_{r \rightarrow 0} \rightarrow (0)^{l+1} \rightarrow 0$$

Regular Solution

$$s = -l$$

$$u \sim r^{-l}$$

$$\lim_{r \rightarrow 0} \rightarrow (0)^{-l} \rightarrow \infty$$

Iregular Solution

سپس در فواصل خیلی دور به عنوان دومین حالت حدی شکل تابع را بررسی می کنیم.

$$\frac{d^2 u_{nlm}(r)}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E - V(r) - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right] u_{nlm}(r) = 0$$

$$r \rightarrow \infty$$



$$V(r) \rightarrow 0$$

$$\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \rightarrow 0$$

$$\frac{d^2 u_{nlm}(r)}{dr^2} + \frac{2\mu E}{\hbar^2} u_{nlm}(r) \approx 0$$

شرط مجذورا انتگرال پذیری ایجاب می کند که:

$$1 = \int d^3r |\Psi(\mathbf{r})|^2 = \int_0^\infty r^2 dr |R_{nlm}(r)|^2 \int d\Omega |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2$$

$$= \int_0^\infty r^2 dr |R_{nlm}(r)|^2 = \int_0^\infty dr |u_{nlm}(r)|^2$$

بنابراین $u_{nlm}(r)$ نیز باید در بینهایت به سمت صفر میل کند:

$$u \sim \exp(-\alpha r)$$

جواب مجانبی

$$\frac{2\mu E}{\hbar^2} = -\alpha^2$$

اگر $E < 0$ باشد، آنگاه:

اگر $E > 0$ باشد، ما فقط جوابهایی را داریم که در یک جعبه قابل نرمالیزه شدن باشند:

$$\frac{2\mu E}{\hbar^2} = k^2$$

$$\exp(-ikr) \text{ \& \; } \exp(ikr)$$

یک ترکیب
خطی از توابع:

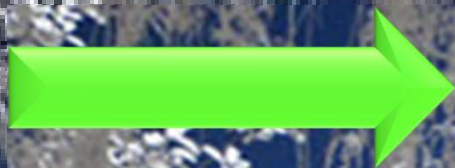
ترکیب خطی مناسب فوق از این شرط تعیین می شود که جواب مجانبی به طور پیوسته به سمت جواب **regular** در مبدا میل کند.

ذره آزاد: $V(r)=0$

در این حالت اگرچه $v(r)=0$ است، اما هنوز سد پتانسیل گریز از مرکز وجود دارد.
در این حالت معادله شعاعی را می توان به صورت زیر نوشت:

$$\left[\frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R(r) + k^2 R(r) = 0$$

$$\rho = kr$$



$$\left[\frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} + \frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] R(\rho) + R(\rho) = 0$$

تمرین: توابع خاص بسل را با استفاده از مرجع آرفکن خلاصه کنید.

معادله فوق را می توان بر حسب توابع ساده حل کرد. جوابهای آن توابع بسل کروی هستند.

$$j_l(\rho) = (-\rho)^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l \left(\frac{\sin \rho}{\rho} \right)$$

جوابهای منظم معادله فوق عبارتند از:

$$n_l(\rho) = -(-\rho)^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l \left(\frac{\cos \rho}{\rho} \right)$$

جوابهای نامنظم معادله فوق عبارتند از:

چند تابع اول آنها در زیر نوشته شده اند:

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

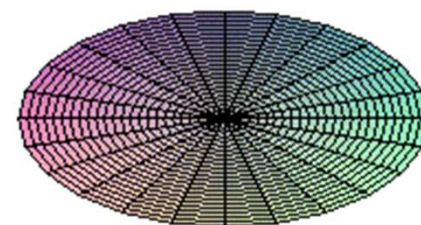
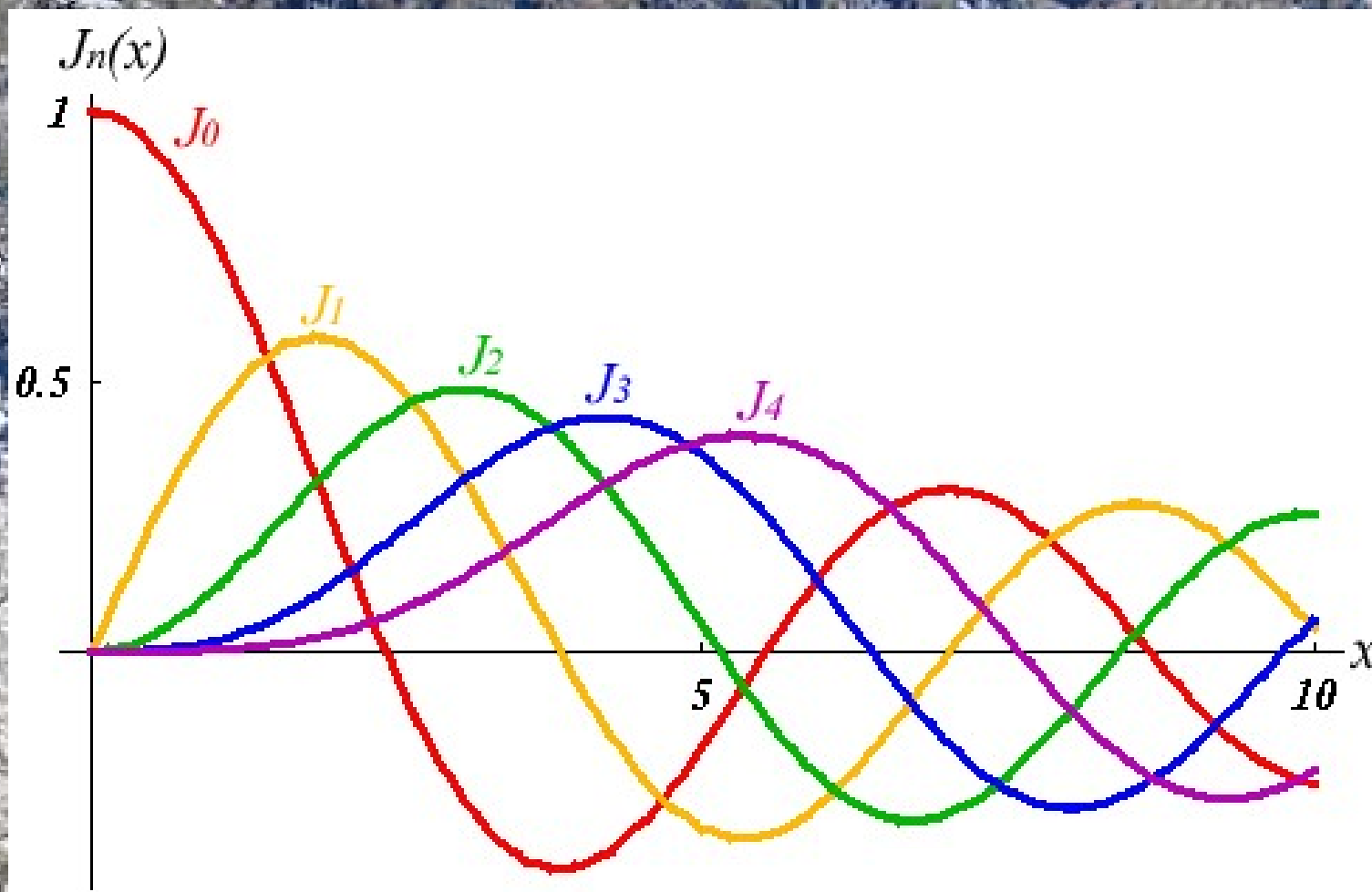
$$j_1(\rho) = \frac{\sin \rho}{\rho^2} - \frac{\cos \rho}{\rho}$$

$$j_2(\rho) = \left(\frac{3}{\rho^3} - \frac{1}{\rho} \right) \sin \rho - \frac{3}{\rho^2} \cos \rho$$

$$n_0(\rho) = -\frac{\cos \rho}{\rho}$$

$$n_1(\rho) = -\frac{\cos \rho}{\rho^2} - \frac{\sin \rho}{\rho}$$

$$n_2(\rho) = -\left(\frac{3}{\rho^3} - \frac{1}{\rho} \right) \cos \rho - \frac{3}{\rho^2} \sin \rho$$



$$h_l^{(1)}(\rho) = j_l(\rho) + in_l(\rho)$$

ترکیبهای زیر توابع هنکل نام دارند:

$$h_l^{(2)}(\rho) = (h_l^{(1)}(\rho))^*$$

چند تابع هنکل در زیر لیست شده اند.

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

$$h_1^{(1)}(\rho) = -\frac{\exp(i\rho)}{\rho} \left(1 + \frac{i}{\rho}\right)$$

$$h_2^{(1)}(\rho) = \frac{i \exp(i\rho)}{\rho} \left(1 + \frac{3i}{\rho} - \frac{3}{\rho^2}\right)$$

الف) رفتار در نزدیکی مبدا $\rho \ll 1$

موارد خاص جالب توجه:

$$j_l(\rho) = \frac{\rho^l}{1.3.5...(2l+1)} = \frac{\rho^l}{(2l+1)!!}$$

$$n_l(\rho) = -\frac{1.3.5...(2l-1)}{\rho^{l+1}} = -\frac{(2l-1)!!}{\rho^{l+1}}$$

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

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

ب) رفتار مجانبی $\rho \gg 1$

به طوری که:

جواب پتانسیل $V=0$ که در مبدا منظم باشد به صورت زیر است:

$$h_l^{(1)}(\rho) \approx \frac{-i}{\rho} \exp\left[i\left(\rho - l\frac{\pi}{2}\right)\right]$$

$$R_l(r) = j_l(kr)$$

پس رفتار مجانبی آن به صورت زیر است:

$$r \rightarrow \infty$$

$$h_l^{(1)}(r) \approx \frac{1}{2ikr} \left\{ \exp[-i(\rho - l \frac{\pi}{2})] - \exp[i(\rho - l \frac{\pi}{2})] \right\}$$

موج کروی ورودی

موج کروی خروجی

شکل تعمیم یافته شار در سه بعد:

شار موج کروی فوق را حساب کنید:

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2i\mu} \left\{ \Psi^*(\mathbf{r}) \nabla \Psi(\mathbf{r}) - \Psi(\mathbf{r}) \nabla \Psi^*(\mathbf{r}) \right\}$$

که خواهیم دید که شار برای $-\mathbf{r}$ های بزرگ فقط در جهت شعاعی دارای اهمیت خواهد بود.

$$\int d\Omega \hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{2i\mu} \int d\Omega \left\{ \Psi^*(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial r} \Psi(\mathbf{r}) - \Psi(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial r} \Psi^*(\mathbf{r}) \right\}$$

$$\Psi(\mathbf{r}) = C \frac{\exp[\pm ikr]}{r} Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

برای یک جواب به صورت زیر:

به دست می آوریم:

$$1 = \int d\Omega |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2$$

با علم به این که:

$$j_r = \frac{\hbar}{2i\mu} \left\{ |C|^2 |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 \left[\pm \frac{\exp(\mp ikr)}{r} \left(\pm ik \frac{\exp(\pm ikr)}{r} - \frac{\exp(\pm ikr)}{r^2} \right) - C.C. \right] \right\}$$

چرا؟

$$j_r = \pm \frac{\hbar k |C|^2 |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2}{\mu} \frac{1}{r^2}$$

که در آن علامت مثبت به شار خروجی و علامت منفی به شار ورودی اشاره دارند.

چون:

$$j_r = \frac{\hbar}{2i\mu} \left\{ |C|^2 |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 \left[\frac{\exp(-ikr)}{r} \left(ik \frac{\exp(ikr)}{r} - \frac{\exp(ikr)}{r^2} \right) - \frac{\exp(ikr)}{r} \left(-ik \frac{\exp(-ikr)}{r} - \frac{\exp(-ikr)}{r^2} \right) \right] \right\}$$

$$j_r = \frac{\hbar}{2i\mu} |C|^2 |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 \left\{ \left[\left(ik \frac{1}{r^2} - \frac{1}{r^3} \right) - \left(-ik \frac{1}{r^2} - \frac{1}{r^3} \right) \right] \right\} \quad j_r = + \frac{\hbar k |C|^2 |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2}{\mu} \frac{1}{r^2}$$

و به همین ترتیب می توان برای علامت منفی عمل کرد.

عامل یا ضریب $1/r^2$ که از محاسبات بالا استخراج شد در واقع برای بقاء شار الزامی است، چون در این صورت شار وارد شده یا خارج شده از سطح کره ای به شعاع r مستقل از r می شود.

حال به محاسبه شار کل شعاعی می پردازیم:

$$\int d\Omega \hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}) = \int r^2 d\Omega \frac{\hbar k |C|^2 |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2}{\mu} \frac{1}{r^2} - \int r^2 d\Omega \frac{\hbar k |C|^2 |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2}{\mu} \frac{1}{r^2}$$

$$\int d\Omega \hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar k |C|^2}{\mu} \int |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 d\Omega - \frac{\hbar k |C|^2}{\mu} \int |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 d\Omega = 0$$

پس شار کل شعاعی صفر شد همان طور باید می شد زیرا نه چشمه داریم و نه چاه.

قبلا گفتیم که حتی اگر پتانسیل هم داشته باشیم و پتانسیل حقیقی باشد باز هم قانون بقاء شار را خواهیم داشت، پس در حالت کلی می توان گفت که در حضور پتانسیل حقیقی قانون بقاء شار برای جواب کلی زیر در فواصل دور:

$$R_l(r) \cong -\frac{1}{2ikr} \left[\exp\left(-i(kr - l \frac{\pi}{2})\right) - S_l \exp\left(i(kr - l \frac{\pi}{2})\right) \right]$$

$$|S_l(k)|^2 = 1$$

ایجاب می کند که:

چه در غیر این صورت شار خروجی با شار ورودی متفاوت می شد و قانون بقاء به هم می خورد.

تابعی که مربع قدر مطلق آن برابر واحد باشد در حالت کلی می تواند به صورت زیر نوشته شود:

$$S_l(k) = \exp(2i\delta_l(k))$$

$$|S_l(k)|^2 = 1$$

تابع حقیقی $\delta_l(k)$ جابه جایی فاز (phase shift) نامیده می شود، زیرا تابع شعاعی در ناحیه مجانبی می تواند به صورت زیر نوشته شود:

$$R_l(r) \cong -\frac{1}{2ikr} \left[\exp\left(-i(kr - l\frac{\pi}{2})\right) - \exp(2i\delta_l(k)) \exp\left(i(kr - l\frac{\pi}{2})\right) \right] \times \frac{\exp(-i\delta_l(k))}{\exp(-i\delta_l(k))}$$

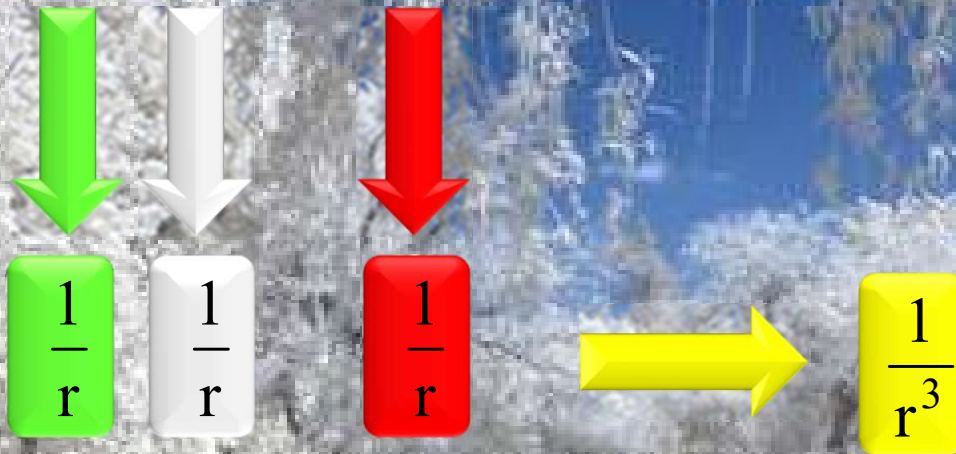
$$R_l(r) \cong \exp(i\delta_l(k)) \frac{\sin\left(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l(k)\right)}{kr}$$

جواب ذره آزاد اگر $\delta_l(k)=0$

جدای از ضریب فاز در جلوی کسر عبارت فوق نسبت به جواب مجانبی ذره آزاد فقط به اندازه یک شیفت به اندازه $\delta_l(k)$ در فاز تابع سینوسی فرق دارد.

دقت می کنیم که شار در جهت θ به صورت زیر است:

$$\mathbf{j} \cdot \hat{\theta} = \frac{\hbar}{2i\mu} \left\{ \Psi^*(\mathbf{r}) \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \Psi(\mathbf{r}) - \Psi(\mathbf{r}) \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \Psi^*(\mathbf{r}) \right\} \quad \sim \frac{1}{r^3}$$

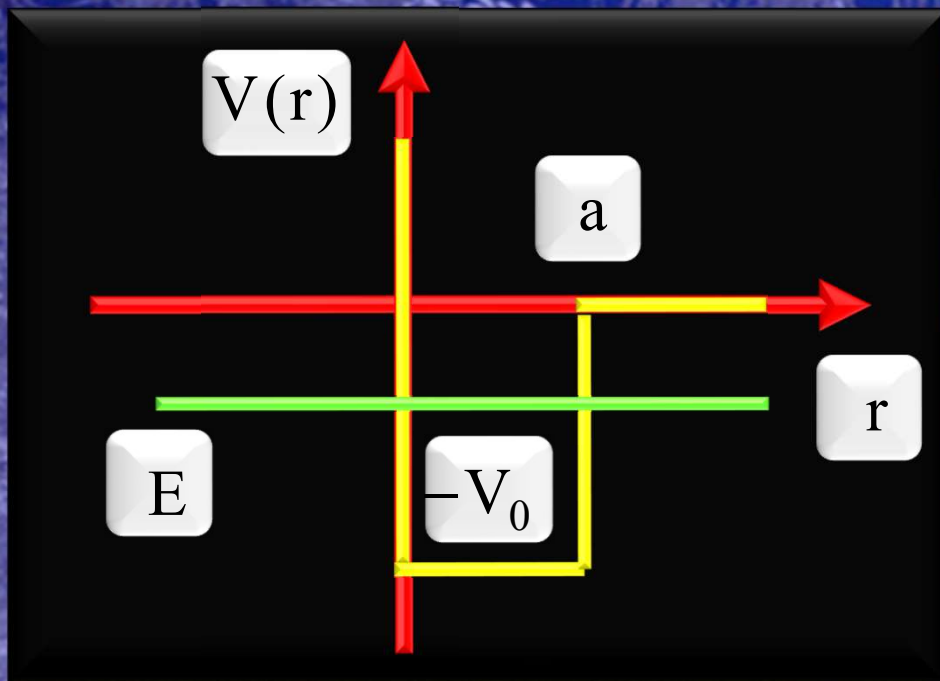


$$\int r^2 d\Omega \mathbf{j}_\theta = (\text{depends on } 1/r) \quad \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0$$

تمرین: نشان دهید که شار در راستای بردار ϕ هم برابر صفر است.

بنابراین در فواصل دور فقط شار شعاعی باید در نظر گرفته شود و می توان از شارهای زاویه ای صرف نظر کرد.

ذره در چاه کروی، حالت‌های مقید



پتانسیل زیر را در نظر بگیرید:

حالت مقید:

$$E < 0$$

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

به چاه فوق چاه پتانسیل یک بعدی نیز می‌تواند اطلاق شود، زیرا عملاً مساله یک مساله یک بعدی است که در آن فقط مختصه r وجود دارد.

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} R + \frac{2\mu}{\hbar^2} [V_0 + E] R = 0 \quad r \leq a$$

معادله شعاعی برای پتانسیل فوق به صورت زیر خواهد شد:

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} R + \frac{2\mu E}{\hbar^2} R = 0 \quad r > a$$

$$\frac{2\mu E}{\hbar^2} = -\alpha^2$$

ما به دنبال جوابهای مقید می گردیم که برای آنها $E < 0$ است. پس می نویسیم:

$$\frac{2\mu}{\hbar^2} [V_0 + E] = \kappa^2$$

مطابق شکل $E > -V_0$ اختیار شده است. پس می نویسیم:

$$R(r) = A j_l(\kappa r)$$

جواب برای $r < a$ که باید در مبداء منظم باشد، به صورت زیر است:

پاسخ برای $r > a$ باید وقتی که $r \rightarrow \infty$ میل می کند متناهی باشد. معادله دوم برای نواحی $r > a$ ، همان معادله بسل است با این تفاوت که به جای κ ، $i\alpha$ قرار داده شده است، پس دیگر جواب به صورت $j_l(\kappa r)$ یعنی به صورت نوسانی $\exp(i\kappa r)$ نمی تواند باشد و باید به طور نمایی افت کند.

$$R(r) \propto j_l(i\alpha r) + \text{in}_l(i\alpha r)$$

این جمله هم باید باشد زیرا در $r > a$ مشکل بینهایت شدن در مبداء وجود ندارد.

$$R(r) = B h_l^{(1)}(i\alpha r)$$

$$A j_l(\kappa r) \Big|_{r=a} = B h_l^{(1)}(i\alpha r) \Big|_{r=a}$$

توابع موج و مشتق آنها باید در $r=a$ پیوسته باشند:

$$A j_l(\rho) \Big|_{\rho=\kappa a} = B h_l^{(1)}(\rho) \Big|_{\rho=i\alpha a}$$

از تقسیم دو رابطه زرد رنگ بر هم می توان شرطهای پیوستگی توابع موج و مشتق آنها را با یک ضابطه به صورت زیر نمایش داد:

$$A \frac{dj_l(\kappa r)}{dr} \Big|_{r=a} = B \frac{dh_l^{(1)}(i\alpha r)}{dr} \Big|_{r=a}$$

$$A \frac{dj_l(\rho)}{d(\frac{\rho}{\kappa})} \Big|_{\rho=\kappa a} = B \frac{dh_l^{(1)}(\rho)}{d\frac{\rho}{i\alpha}} \Big|_{\rho=i\alpha a}$$

$$\kappa \frac{dj_l(\rho)}{d\rho} \Big|_{\rho=\kappa a} = i\alpha \frac{dh_l^{(1)}(\rho)}{d\rho} \Big|_{\rho=i\alpha a}$$

این یک معادله پیچیده غیر جبری (transcendental) شامل V ، E و α است.

$$A \kappa \frac{dj_l(\rho)}{d\rho} \Big|_{\rho=\kappa a} = B i\alpha \frac{dh_l^{(1)}(\rho)}{d\rho} \Big|_{\rho=i\alpha a}$$

این معادله برای حالت $l=0$ بسیار ساده خواهد شد اگر از $u(r)=rR(r)$ استفاده کنیم:

$$l = 0 \quad R(r) = A j_0(\kappa r) = A \frac{\sin(\kappa r)}{\kappa r} \quad r \leq a$$

$$l = 0 \quad R(r) = B j_0(i\alpha r) + i B n_0(i\alpha r) = B \frac{\sin(i\alpha r)}{i\alpha r} - i B \frac{\cos(i\alpha r)}{i\alpha r} \quad r > a$$

رابطه اخیر را می توان به طور ساده تر بر حسب توابع هنکل نوشت:

$$l = 0 \quad R(r) = B h_0^{(1)}(i\alpha r) = B \frac{\exp(i(i\alpha r))}{i(i\alpha r)} = B \frac{\exp(-\alpha r)}{-\alpha r} \quad r > a$$

$$l = 0 \quad u(r) = A \sin(\kappa r)$$

$$u(r) = rR(r)$$

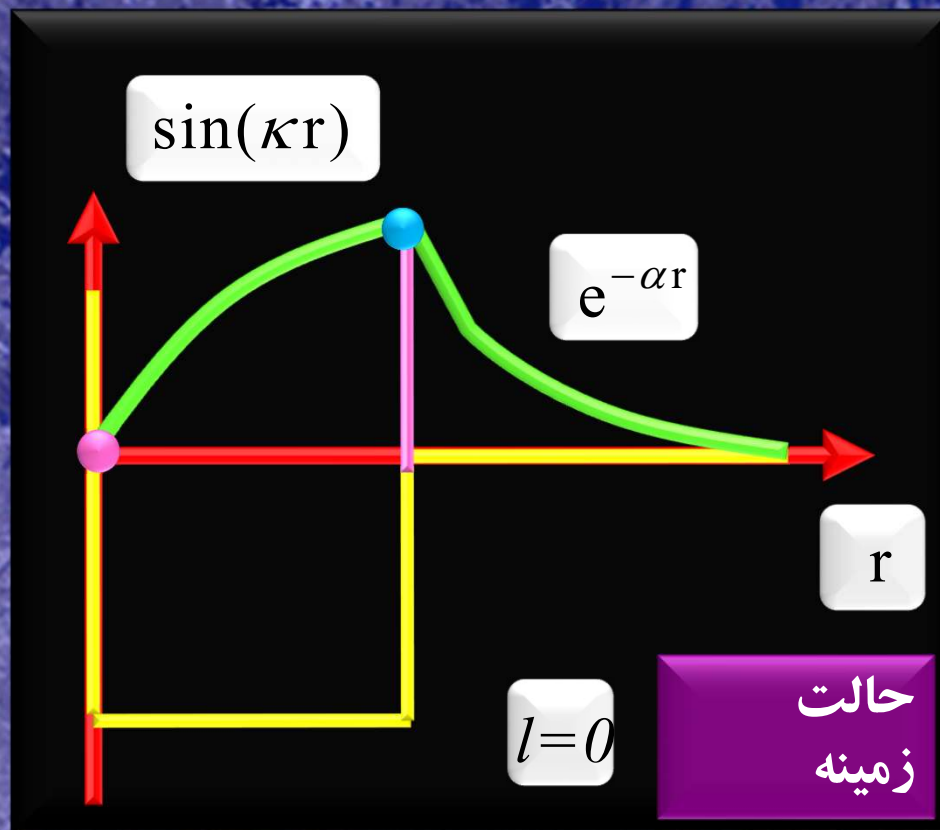
$$l = 0 \quad u(r) = B \exp(-\alpha r)$$

که از این معادله می توان E یعنی ویژه مقادیر را بر حسب a و V_0 به دست آورد.

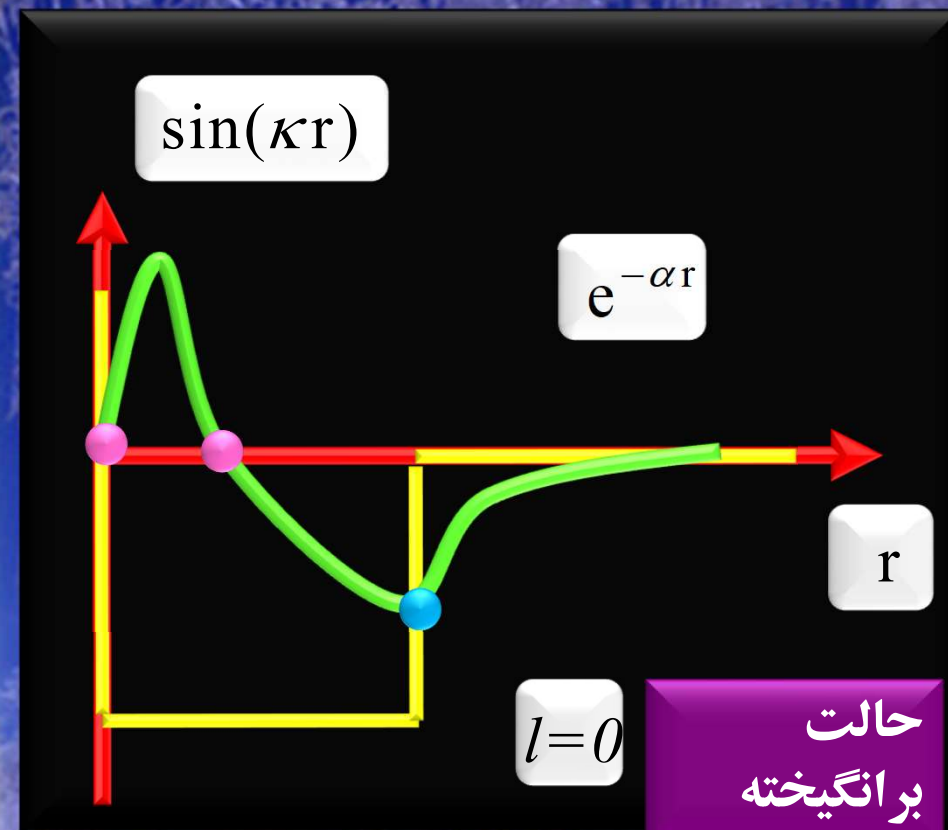
$$A \sin(\kappa a) = B e^{-\alpha a}$$

$$A \kappa \cos(\kappa a) = -B \alpha e^{-\alpha a}$$

$$\kappa \cot(\kappa a) = -\alpha$$



یک حالت مقید



دو حالت
مقید

$$\left. \kappa \frac{dj_l(\rho)}{d\rho} \right|_{\rho=\kappa a} = i\alpha \left. \frac{dh_l^{(1)}(\rho)}{d\rho} \right|_{\rho=i\alpha a}$$

حال بیاید به معادله پیچیده غیر جبری اصلی برگردیم. برای حالتی که یک پتانسیل خیلی عمیق داریم که در آن $\kappa a \gg 1$ باشد.

در این حالت طرف چپ معادله ساده می شود، زیرا ما می توانیم از شکل مجانبی $j_l(\rho)$ استفاده کنیم:

$$\rho \gg 1 \quad j_l(\rho) \approx \frac{1}{\rho} \sin(\rho - l \frac{\pi}{2})$$

$$\frac{dj_l(\rho)}{d\rho} \approx \frac{1}{\rho} \cos(\rho - l \frac{\pi}{2}) - \frac{1}{\rho^2} \sin(\rho - l \frac{\pi}{2})$$

$$\frac{\frac{dj_l(\rho)}{d\rho}}{j_l(\rho)} \approx \cot(\rho - l \frac{\pi}{2}) - \frac{1}{\rho}$$

طرف
معادله
جبری
چپ
غیر

$$= \kappa \left(\cot(\rho - l \frac{\pi}{2}) - \frac{1}{\rho} \right) \Big|_{\rho=\kappa a}$$

طرف راست معادله مستقل از V است.

$$= \kappa \left(\cot(\kappa a - l \frac{\pi}{2}) - \frac{1}{\kappa a} \right)$$

$$= \kappa \cot(\kappa a - l \frac{\pi}{2}) - \frac{1}{a}$$

زیرا در $\rho = i\alpha a$ ارزیابی می شود که در آن α مستقل از V_0 است و فقط به E بستگی دارد.

طرف چپ وابسته به V_0 یعنی متناسب با K و بنابراین متناسب با $V_0^{1/2}$ است. پس برای چاه های عمیق $V_0 \gg E$ آنگاه طرف راست چون متناسب با α و بنابراین متناسب با $E^{1/2}$ است بسیار کوچک می شود، برای آن که تساوی بتواند برقرار شود باید $\cot(\kappa a - l\pi/2)$ به سمت صفر میل کند و خیلی کوچک شود تا اثر بزرگ بودن K را از بین برده و تساوی را بتواند برقرار کند.

اگر $E \ll V_0$ باشد، بزرگی κa ایجاب می کند که کتانژانت به صفر نزدیک شود، بنابراین تقریباً می توان نوشت:

$$\kappa a - l \frac{\pi}{2} \cong (n + 1/2)\pi$$

$$\frac{2\mu}{\hbar^2} [V_0 + E] = \kappa^2$$

$$E \ll V_0$$

$$\kappa \cong \kappa_0 \left(1 + \frac{E}{2V_0} \right)$$

$$\kappa_0^2 = \frac{2\mu V_0}{\hbar^2}$$

$$\kappa_0 a \left(1 + \frac{E}{2V_0} \right) - \frac{l\pi}{2} = \left(n + \frac{1}{2} \right) \pi$$

$$\frac{E}{2V_0} = \frac{l\pi}{2\kappa_0 a} + \frac{\left(n + \frac{1}{2} \right) \pi}{\kappa_0 a} - 1$$

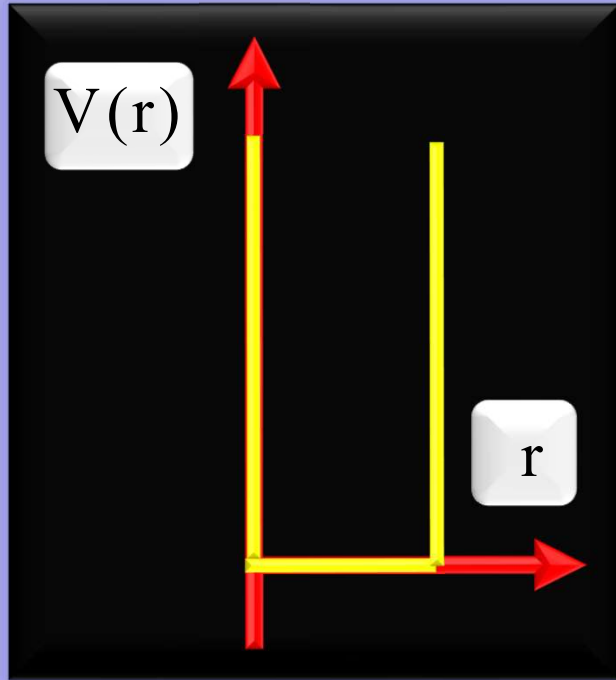
بنابراین ترازهایی که دور از ته چاه هستند به ازای تمام l ها تقریباً با فواصل یکسان از یکدیگر واقع شده اند برای حالت $\kappa_0 a \gg 1$ ، چون:

$$\frac{E}{2V_0} = -1 + \frac{(n + (l + a)/2)\pi}{\kappa_0 a}$$

$$\left. \frac{E}{2V_0} \right|_{n=n+1} - \left. \frac{E}{2V_0} \right|_{n=n} = \frac{\pi}{\kappa_0 a} = \text{const.} = \frac{\Delta E}{2V_0}$$

$$\Delta E = \text{const.}$$

حال دیواره های چاه مربعی شعاعی را بینهایت فرض می کنیم، که این مساله معادل با یک کره سخت است.



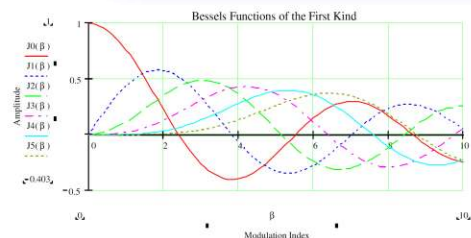
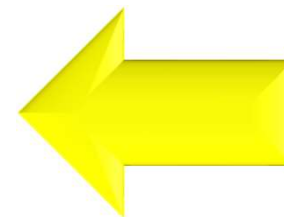
$$V(r) = \begin{cases} 0 & r < a \\ \infty & r \geq a \end{cases}$$

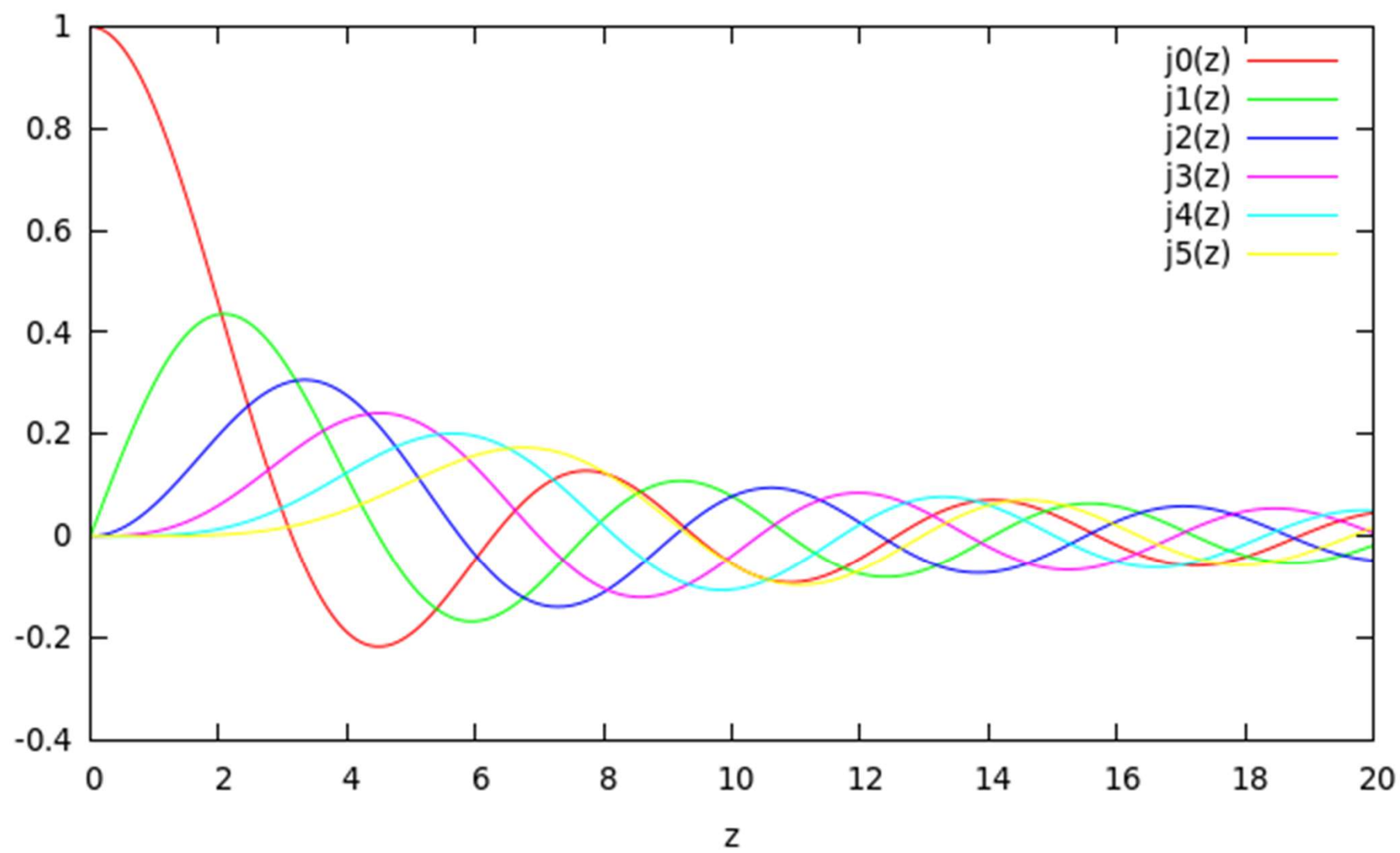
$$\frac{2\mu E}{\hbar^2} = \kappa^2$$

جوابی که در مبداء منظم باشد را باید انتخاب کنیم:

$$j_l(\kappa a) = 0$$

$$R(r) = A j_l(\kappa r)$$





	S	P	D	F	G	H
	$l=0$	$l=1$	$l=2$	$l=3$	$l=4$	$l=5$
$n=1$	3.14	4.49	5.76	6.99	8.18	9.36
$n=2$	6.28	7.73	9.10	10.42		
$n=3$	9.42	10.9				

اگر از نمادهای اسپکتروسکوپی استفاده کنیم آنگاه می توان آنها را به صورت زیر مرتب کرد:

1S	1P	1D	2S	1F	2P	1G	2D	1H	3S
----	----	----	----	----	----	----	----	----	----

یا نوتاسیون آشنا تر برای شما: / به اندیس n اضافه شود.

1S	2P	3D	2S	4F	3P	5G	4D	6H	3S
----	----	----	----	----	----	----	----	----	----

حال فرض کنید که یک هسته داریم که از تعدادی پرتون و نوترون تشکیل شده است.

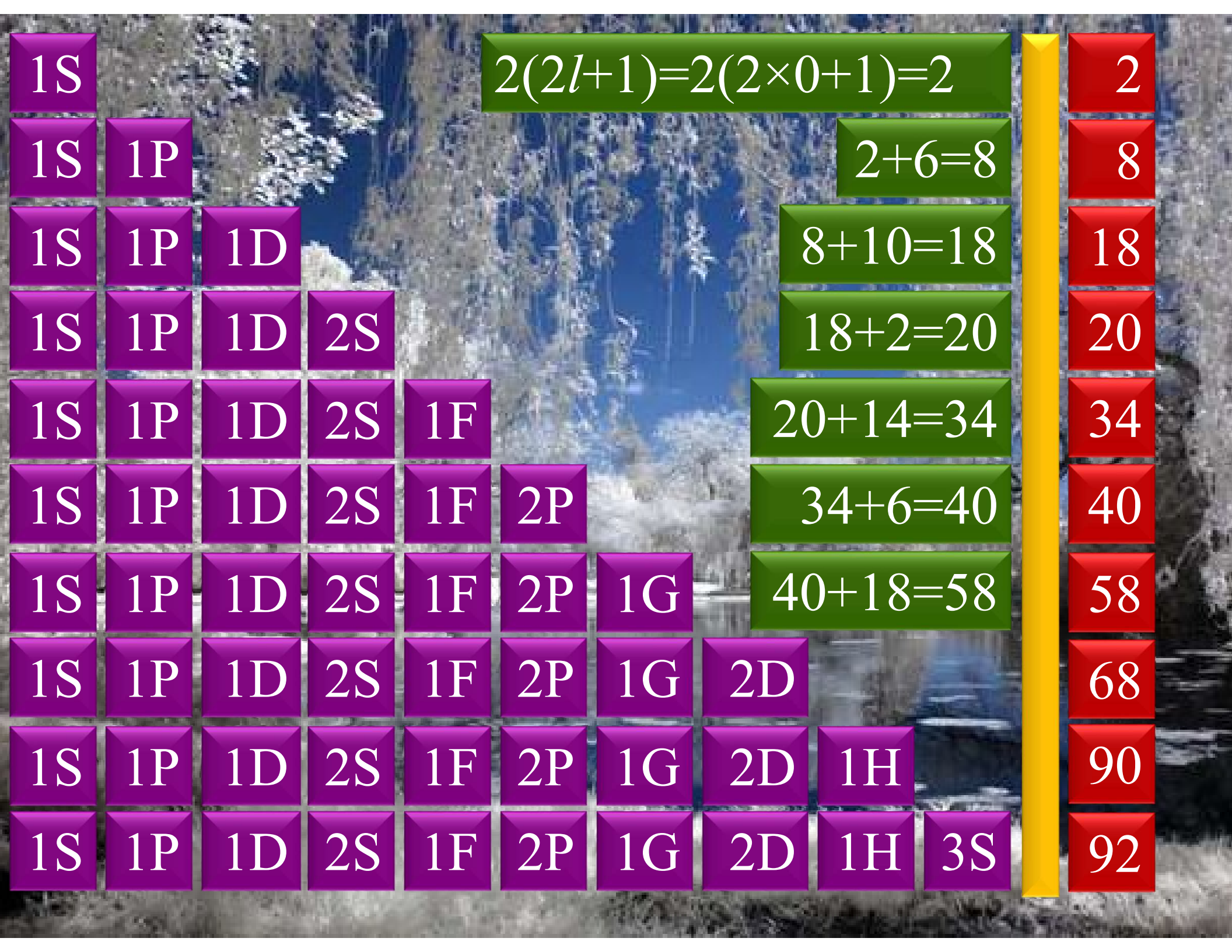
یکی از مدل‌های هسته ای مدل لایه ای نام دارد که در آن فرض بر این است که پروتون‌ها و نوترون‌ها (هستکها) در یک چاه کروی سخت توزیع شده اند.

چون نوکلئون‌ها (پروتون‌ها و نوترون‌ها) فرمیون هستند پس اسپین نصف صحیح دارند و از اصل طرد نیز باید پیروی کنند.

فلذا طریقه پر کردن ترازهای آنها به صورت زیر است که منجر به اعداد جادویی در فیزیک هسته ای خواهد شد:

اعداد جادویی

Magic Numbers



اعداد 2, 8, 18, 20, 34, 40, 58, 68, 90, 92 اعداد جادویی ای هستند که توسط مدل لایه ای پیش بینی می شوند.

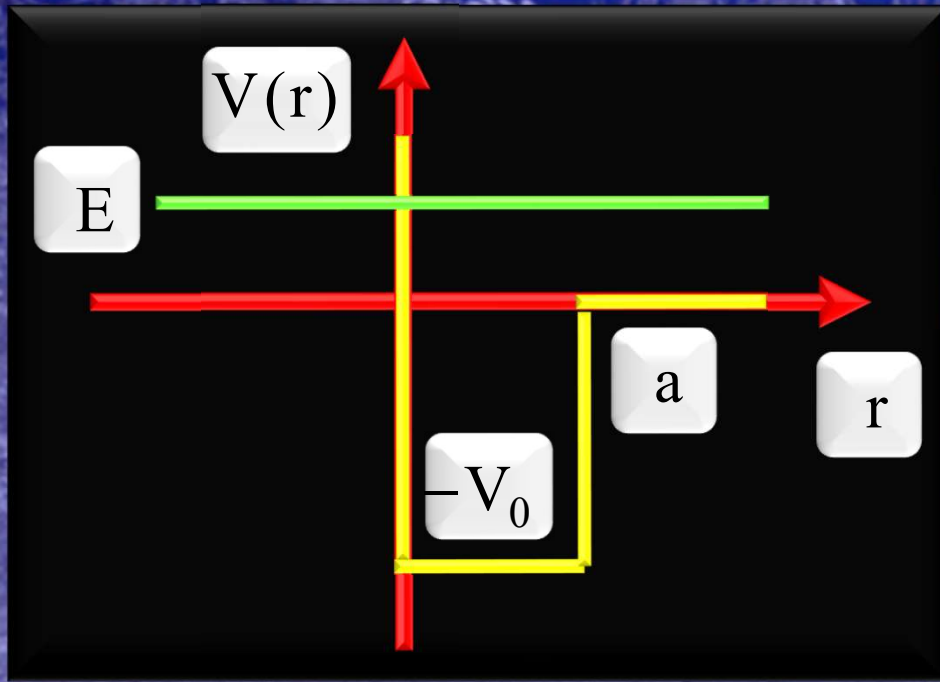
اگر چه اعداد جادویی واقعی با این اعداد اندکی تفاوت دارند، اما قابل مقایسه هستند.

علت تفاوت اعداد جادویی واقعی این است که پتانسیل در واقع کاملاً سخت نیست و از طرفی هم نوکلئونها با هم برهمکنش دارند.

فلذا پتانسیل واقعی هسته ای از آن چه که ما در اینجا در نظر گرفتیم متفاوت است و به همین دلیل اعداد جادویی واقعی که از اهمیت زیادی برخوردارند با این اعداد اندکی تفاوت دارند.



ذره در چاه کروی، حالت‌های غیر مقید



پتانسیل زیر را در نظر بگیرید:

حالت‌های غیر مقید:

$$E > 0$$

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

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} R + \frac{2\mu}{\hbar^2} [V_0 + E] R = 0 \quad r \leq a$$

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} R + \frac{2\mu E}{\hbar^2} R = 0 \quad r > a$$

معادله شعاعی برای پتانسیل فوق به صورت زیر خواهد شد:

$$\frac{2\mu E}{\hbar^2} = k^2$$

ما به دنبال جوابهای غیر مقید می گردیم که برای آنها $E > 0$ است. پس می نویسیم:

$$\frac{2\mu}{\hbar^2} [V_0 + E] = \kappa^2$$

مطابق شکل $E > -V$ اختیار شده است. پس می نویسیم:

$$R(r) = A j_l(\kappa r)$$

جواب برای $r < a$ مانند حالت مقید است که باید در مبداء منظم باشد، به صورت زیر است:

پاسخ برای $r > a$ بر خلاف حالت مقید که به طور نمایی برای فواصل دور به سمت صفر میل می کرد اکنون به طور نوسانی رفتار می کند:

$$R(r) = B j_l(\kappa r) + C n_l(\kappa r)$$

این جمله هم باید باشد زیرا در $r > a$ مشکل بینهایت شدن در مبداء وجود ندارد.

$$\kappa \left. \frac{dj_l(\rho) / d\rho}{j_l(\rho)} \right|_{\rho=\kappa a} = k \left. \frac{B dj_l(\rho) / d\rho + C dn_l(\rho) / d\rho}{B j_l(\rho) + C n_l(\rho)} \right|_{\rho=ka}$$

پیوستگی همزمان
تابع موج و
مشتق آن

از رابطه فوق می توان نسبت C/B را محاسبه کرد. محاسبه واقعی این نسبت به صورت جبری جزء در حالت $l=0$ کار خسته کننده ای است. بنابراین به جای محاسبه جبری خسته کننده این نسبت به ازای l -های مختلف، از روش ساده تر دیگری با رفتن به نواحی دور دست استفاده می کنیم چون در این صورت می توان از روابط مجانبی استفاده کرد:

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

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

رفتار مجانبی $\rho \gg 1$

که اگر آن را با
رابطه زیر مقایسه
کنیم:

$$r \gg 1$$

$$R_l(r) \approx \frac{B}{kr} \left[\sin\left(kr - l \frac{\pi}{2}\right) - \frac{C}{B} \cos\left(kr - l \frac{\pi}{2}\right) \right]$$

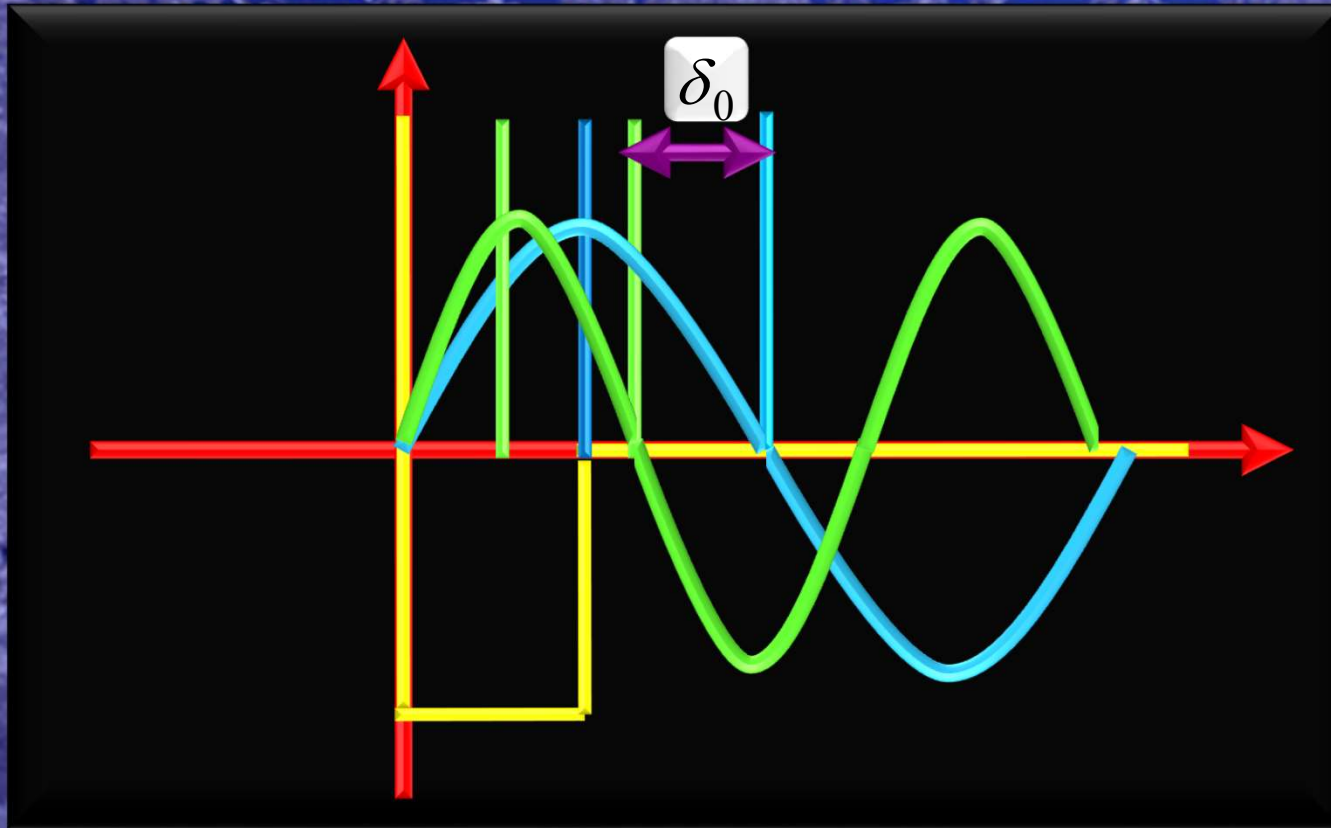
$$R_l(r) \cong \exp(i\delta_l(k)) \frac{\sin\left(kr - l \frac{\pi}{2} + \delta_l(k)\right)}{kr}$$

$$= \frac{1}{kr} \exp(i\delta_l(k)) \left[\sin\left(kr - l \frac{\pi}{2}\right) \cos \delta_l(k) + \cos\left(kr - l \frac{\pi}{2}\right) \sin \delta_l(k) \right]$$

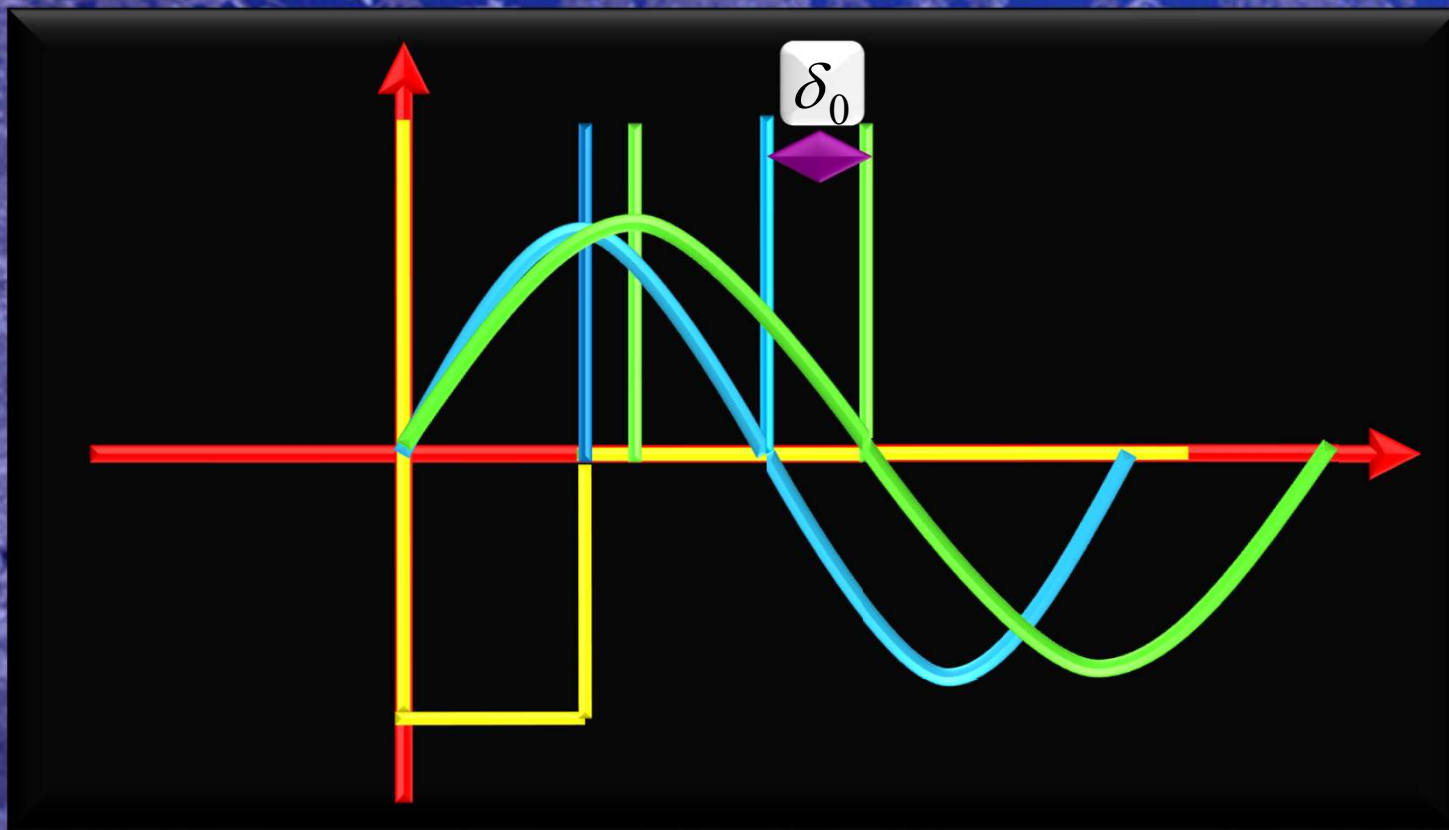
$$\frac{C}{B} = -\tan \delta_l(k)$$

در می یابیم
که:

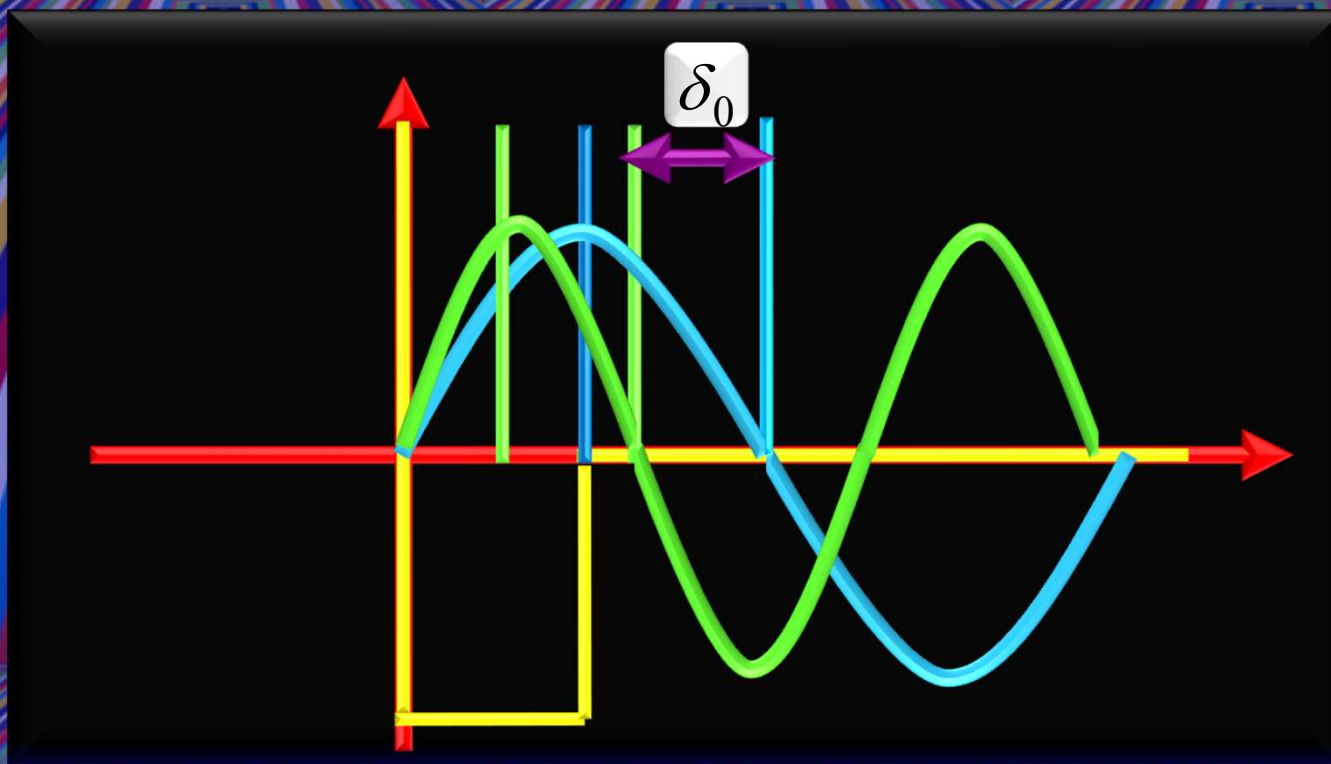
همان طور که برای حالت مقید، استفاده از $u(r)=rR(r)$ محاسبات را بسیار ساده کرد، در اینجا نیز فقط نیاز داریم که $Asinkr+Ccoskr$ و $Bsinkr$ را در $r=a$ مساوی قرار دهیم تا عبارتی برای $\tan\delta_0$ به دست آوریم. نتایج به طور صوری در حالت $l=0$ برای یک چاه جاذب و یک چاه دافع رسم شده است:



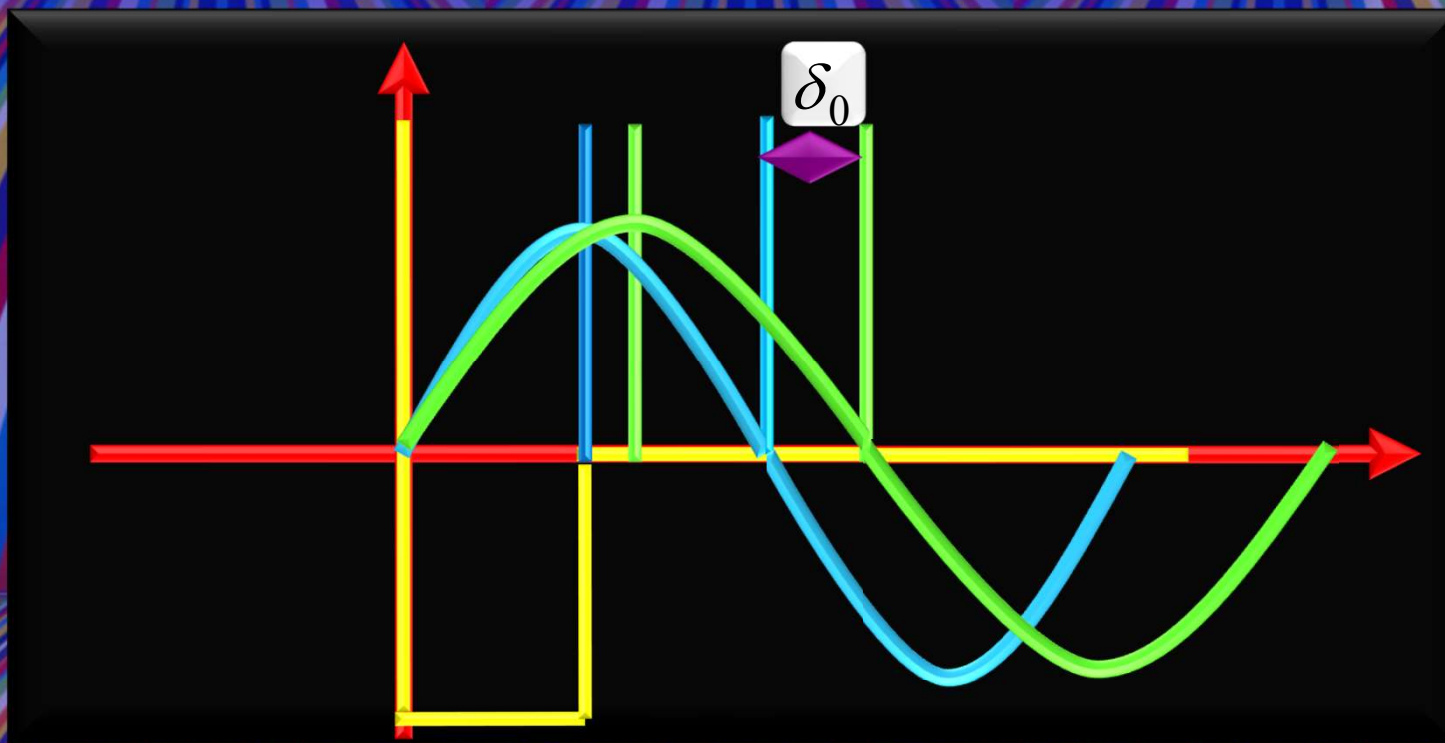
چاه پتانسیل جاذب



چاه پتانسیل دافع



چاه پتانسیل جاذب



چاه پتانسیل دافع

قبل از پایان بردن این فصل عبارت مفید زیر را به دست می آوریم:

$$\exp(ikr \cos \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \theta)$$

برای اثبات به طریق زیر عمل می کنیم:

$J_l(kr) Y_{lm}(\theta, \varphi)$ یک پایه کامل است، پس می توان هر تابع موج $\Psi(\mathbf{r})$ را بر حسب آنها بسط داد:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l A_{lm} j_l(kr) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

حال فرض کنید که تابع موج $\Psi(\mathbf{r})$ پاسخ معادله هلمهولتز $(\nabla^2 + k^2) \Psi(\mathbf{r})$ باشد، یعنی $\Psi(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ باشد. پس:

$$\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l A_{lm} j_l(kr) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

$$\mathbf{k} = k\hat{\mathbf{z}}$$

برای سادگی فرض کنید که پرتوی فرودی در امتداد Z باشد:

$$\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) = \exp(ikr \cos \theta)$$

φ از مساله حذف می شود

$$m = 0$$

$$\exp(ikr \cos \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} A_{l0} j_l(kr) Y_{l0}(\theta, \varphi)$$

$$Y_{l,m}(\theta, \varphi) = (-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}$$

$$Y_{l,0}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta)$$

$$\exp(ikz) = \sum_{l=0}^{\infty} A_l j_l(kr) P_l(\cos \theta) \cdot \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}$$

حال می توان $A_j j_l(kr)$ را به دست آورد: کافی است که طرفین را در $P_{l'}(\cos\theta)$ ضرب و از طرفین انتگرال بگیریم.

$$\int \exp(ikr \cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) d(\cos \theta) \\ = \sum_{l=0}^{\infty} A_l j_l(kr) \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \int P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) d(\cos \theta)$$

$$\frac{1}{2} \int P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) d(\cos \theta) = \frac{\delta_{ll'}}{2l+1}$$

$$\int \exp(ikr \cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) d(\cos \theta) = A_{l'} j_{l'}(kr) \sqrt{\frac{2l'+1}{4\pi}} \frac{2}{2l'+1}$$

$$A_l j_l(kr) = \sqrt{\pi (2l+1)} \int \exp(ikr \cos \theta) P_l(\cos \theta) d(\cos \theta)$$

$$A_l j_l(kr) = \sqrt{\pi(2l+1)} \int_{-1}^1 \exp(ikr \cos \theta) P_l(\cos \theta) d(\cos \theta)$$

عبارت فوق را محاسبه نمایید (راهنمایی: از کتاب آرفکن می توانید استفاده کنید)

$$\int_{-1}^1 \exp(ikr \cos \theta) P_l(\cos \theta) d(\cos \theta) = 2i^l j_l(kr)$$

$$A_l j_l(kr) = \sqrt{\pi(2l+1)} 2i^l j_l(kr)$$

$$A_l = \sqrt{\pi(2l+1)} 2i^l$$

$$\exp(ikr \cos \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{\pi(2l+1)} 2i^l j_l(kr) P_l(\cos \theta) \cdot \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}$$

$$\exp(ikr \cos \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \theta)$$

$$E > 0$$

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

$$E < 0$$

$$\frac{2\mu E}{\hbar^2} = k^2$$

$$\frac{2\mu E}{\hbar^2} = -\alpha^2$$

$$\frac{2\mu}{\hbar^2} [V_0 + E] = \kappa^2$$

$$\frac{C}{B} = -\tan \delta_l(k)$$

$$\frac{2\mu}{\hbar^2} [V_0 + E] = \kappa^2$$

$$R_l(r) = \begin{cases} A j_l(\kappa r) & r \leq a \\ B j_l(\kappa r) + C n_l(\kappa r) & r > a \end{cases}$$

$$R_l(r) = \begin{cases} A j_l(\kappa r) & r \leq a \\ B h_l^{(1)}(i\alpha r) & r > a \end{cases}$$

$$\frac{2\mu E}{\hbar^2} = \kappa^2$$

$$V(r) = \begin{cases} 0 & r \leq a \\ \infty & r > a \end{cases}$$

$$R(r) = A j_l(\kappa r)$$

$$j_l(\kappa a) = 0$$

1S

1P

1D

2S

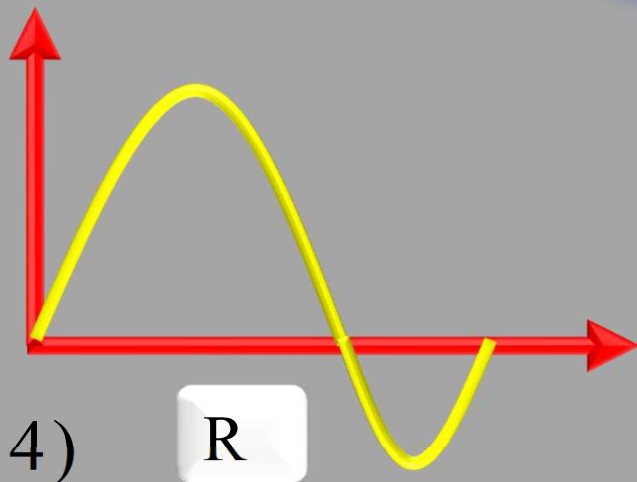
1F

2P

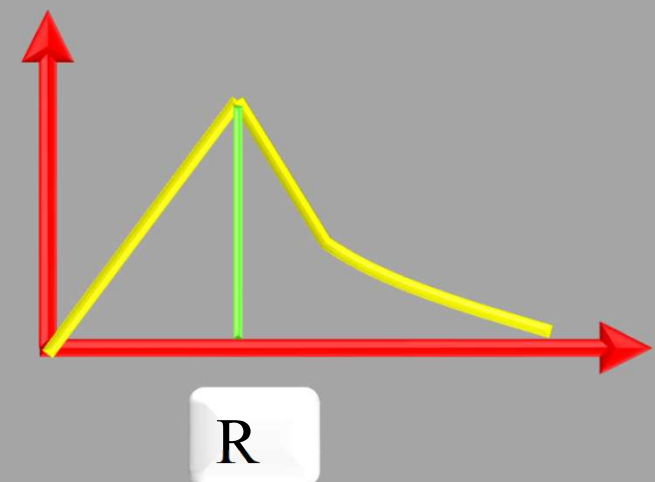
تست 2 (کنکور کارشناسی ارشد سال 1376): تابع موج چاه پتانسیل کروی زیر به کدام شکل بیشتر شباهت دارد؟

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

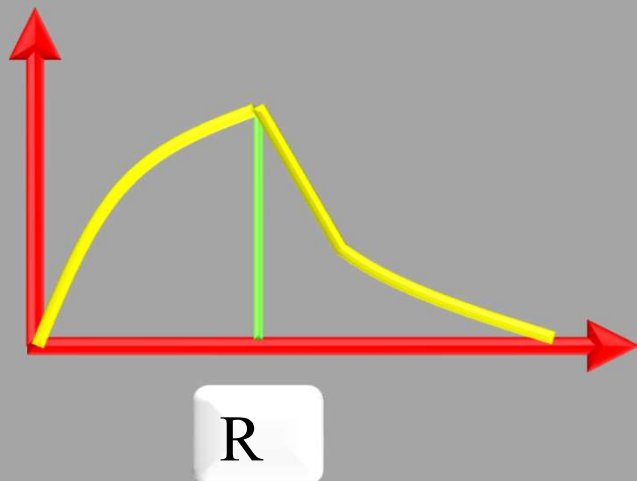
2)



1)



4)



3)

