درس یازدهم: معادله شعاعی شرودینگر در سه بعد

۱ مقدمه

دراین درس معادله شعاعی شرودینگر را برای ذره‌ای که در یک پتانسیل دارای تقارن دورانی حرکت می کند بررسی می کنیم. پس از مطالب کلی که در مورد همه‌ی پتانسیل های صادق است به مثال های خاص و مهم می پردازیم . این مثال ها عبارتند از ذره‌ی آزاد، ذره‌ای که در یک چاه پتانسیل کروی مقید است، نوسانگر هارمونیک سه بعدی و سرانجام اتم هیدروژن.

۲ ملاحظات کلی در باره معادله شعاعی

برای ذره ای که دریک پتانسیل مرکزی حرکت می کند هامیلتونی به شکل زیراست

$$H = \frac{1}{2\mu}\vec{P}\cdot\vec{P} + V(r), \tag{1}$$

که درآن $r = (\vec{R}\cdot\vec{R})^{\frac{1}{2}}$ و جرم ذره را با μ نشان داده ایم. این پتانسیل بوضوح تقارن دورانی دارد و بامولفه های تکانه زاویه ای جابجامی شود. بنابراین می توانیم طیف مشترک H, L_z و L^2 را پیداکنیم. برای این کار ازرابطه $L^2 = R^2P^2 - \vec{R}\cdot\vec{P}^2 + i\hbar(\vec{R}\cdot\vec{P}))$ استفاده می کنیم ومعادله شرودینگر را به شکل زیربازنویسی می کنیم

$$\left[\frac{L^2 + (\vec{r}\cdot\vec{P})^2 - i\hbar\vec{r}\cdot\vec{P}}{2\mu r^2} + V(r)\right]\psi(r,\theta,\phi) = E\psi(r,\theta,\phi), \tag{2}$$

که درآن $\vec{P} = -i\hbar\vec{\nabla}$ عملگرتکانه درپایه مختصات است.

نکته: برای سادگی می توانیم $\hbar$ را برابر با یک قرار دهیم. در پایان برای بدست آوردن مقادیر صحیح عددی می بایست توان های صحیحی از $\hbar$ را در عبارت هایی که بدست می آوریم آنچنان قرار دهیم تا بعد فیزیکی کمیت ها درست در بیاید.

تمرین: در مسئله‌ای که مربوط به یک نوسانگر هارمونیک با جرم m و فرکانس ω است، دستگاه واحدهایی را به کار برده ایم که در آن مقادیر $\hbar$ ،m و ω برابر با یک شده اند. دراین دستگاه متوسط عملگر تکانه و مکان را روی یک حالت محاسبه کرده و مقادیر زیر را بدست آورده‌ایم:

$$\langle X\rangle = \sqrt{3}, \qquad \langle P\rangle = \frac{1}{2}. \tag{3}$$

مقادیرعددی این کمیت ها در دستگاه واحدهای متریک چقدراست.

حال ویژه تابع را به شکل زیردرنظرمی گیریم

$$\psi(r,\theta,\phi) = f(r)Y_{l,m}(\theta,\phi), \tag{4}$$

و پس ازجایگذاری درمعادله فوق به رابطه زیرمی رسیم

$$\left[-\frac{1}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{\mu r}\frac{d}{dr} + V_{eff}(r)\right] f(r) = Ef(r), \tag{5}$$

که درآن V_{eff} پتانسیل موثراست و شکل آن برابراست با

$$V_{eff}(r) = V(r) + \frac{l(l+1)}{2\mu r^2}. \tag{6}$$

ازآنجا که هارمونیک های کروی بهنجارهستند، تابع موج ψ وقتی بهنجار می شود که تابع موج $f(r)$ در شرط زیرصدق کند:

$$\int_0^\infty |f(r)|^2 r^2 dr = 1. \tag{7}$$

هرگاه قراردهیم

$$f(r) = \frac{R(r)}{r}$$

آنگاه معادله حاکم بر R به شکل ساده تر زیردرمی آید که کاملا با معادله یک بعدی شرودینگر برای یک پتانسیل موثر یکسان است:

$$\left[-\frac{1}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2} + V_{eff}(r)\right] R(r) = E\ R(r), \tag{8}$$

حل معادله کامل شرودینگر عبارت است از

$$\psi(r,\theta,\phi) = \frac{R(r)}{r}Y_{l,m}(\theta,\phi). \tag{9}$$

شرط بهنجارش تابع R به صورت زیر است:

$$\int_0^\infty |R(r)|^2 dr = 1. \tag{10}$$

حال به چند نکته توجه می کنیم:

۱ – معادله شعاعی یک معادله ویژه مقداری است که ویژه مقدارها و هم چنین ویژه توابع آن به l بستگی دارد. بنابراین بهتراست که بجای نماد های E و $R(r)$ ازنماد های دقیق تر E_l و $\tilde{R}_{E,l}(r)$ استفاده کنیم. درنتیجه تابع موج باسه عدد کوانتومی E, l و m مشخص خواهد شد که می بایست آن را به شکل زیرنوشت:

$$\psi_{E_l,l,m}(r,\theta,\phi) = \frac{R_{E_l,l}(r)}{r} Y_{l,m}(\theta,\phi). \tag{11}$$

۲ – عدد کوانتومی m درانرژی E_l و در ویژه تابع $\tilde{R}(r)$ وارد نمی شود وتنها در تابع موج زاویه ای وارد شده است. بنابراین همه حالت های $-l \leq m \leq l$ $\psi_{E_l,l,m}$ دارای یک انرژی هستند. این خاصیت نتیجه ای از تقارن دورانی پتانسیل است.

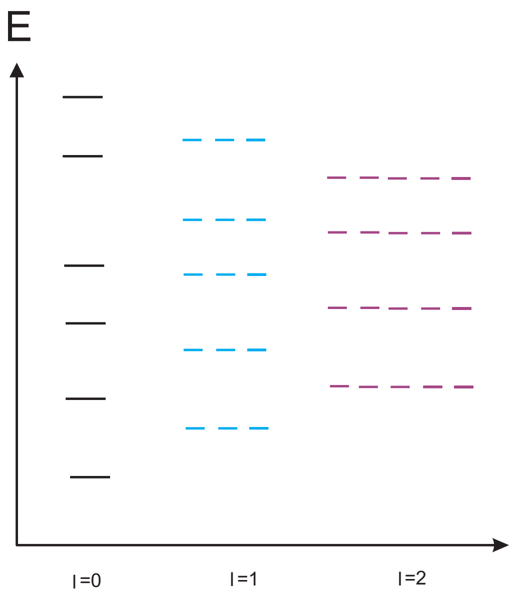
تمرین: با استفاده از این که هامیلتونی با عملگرهای L_x, L_y, L_z جابجا می شود خاصیت بالا را ثابت کنید.

۳ – بسته به نوع پتانسیل، معادله شرودینگر می تواند انرژی های گسسته یا پیوسته و یا هردو را داشته باشد. به عنوان طیف انرژی ذره‌ی آزاد کاملاً پیوسته‌است. طیف انرژی نوسانگر هارمونیک سه بعدی کاملاً گسسته‌است. و طیف انرژی اتم هیدروژن برای حالت های مقید گسسته و برای حالت های آزاد پیوسته‌است.

۴ – قسمت گسسته‌ی طیف انرژی برای هرپتانسیل ِدارای تقارن کروی شبیه به طیف نشان داده شده درشکلِ ۱ خواهد شد. اما برای دو پتانسیل خاص یعنی برای پتانسیل کپلری $V(r) = \frac{K}{r}$ و پتانسیل نوسانگریعنی $V(r) = Kr^2$ مقایر انرژی E به مقدار l نیز بستگی نخواهند داشت و طیف این پتانسیل ها شبیه به شکل نشان داده شده درشکل ِ۲ خواهد شد. این عدم وابستگی ناشی ازیک تقارن اضافی علاوه برتقارن دورانی است که درمورد این دو پتانسیل وجود دارد و درآینده به آن خواهیم پرداخت.

۵ – برای r های کوچک وبه شرط آنکه پتانسیل سریعتراز $\frac{1}{r^2}$ به سمت بی نهایت میل نکند، که برای تمام پتانسیل های متعارف چنین است، معادله شعاعی به شکل زیردرمی آید:

$$\left[-\frac{1}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2\mu r^2}\right] R(r) \approx 0, \tag{12}$$



شکل ۱: نمونه طیف انرژی برای پتانسیلی که دارای تقارن کروی است.

تمرین: نشان دهید که حل این معادله به شکل $R(r) = r^s$ است به شرط آنکه s درمعادله زیرصدق کند:

$$s(s-1) = l(l+1). \tag{13}$$

که نشان می دهد $s = l+1$ و یا $s = -l$. بنابراین تابع موج شعاعی برای r های کوچک به یکی ازدو صورت زیررفتارمی کند:

$$R(r) \longrightarrow r^l \tag{14}$$

ویا

$$R(r) \longrightarrow r^{-l-1} \tag{15}$$

جوابی که برای r های کوچک به صورت 14 رفتارمی کند جواب منظم یا $regular$ و جوابی که به صورت 15 رفتارمی کند جواب نامنظم یا $irregular$ نامیده می شود. هرگاه ناحیه مجاز برای حرکت ذره شامل نقطه‌ی $r=0$ باشد (مثل ذره‌ی آزاد، اتم هیدروژن، ذره‌ی درون چاه پتانسیل کروی و نوسانگرهارمونیک)، جواب نامنظم قابل قبول نخواهد بود زیرا این جواب قابل بهنجار شدن نیست. اما اگر ناحیه مجاز برای حرکت ذره شامل نقطه‌ی $r=0$ نباشد (مثل وقتی که ذره بین دو پوسته کروی حرکت می کند) می بایست جواب نامنظم را نیز نگاه داشت، چرا که دیگر در ناحیه مورد نظر تابع $R(r)$ قابل بهنجارشدن است.

۵ — برای r های بزرگ، و به شرط آنکه پتانسیل در ناحیه محدودی ازفضا حضورداشته باشد که همواره چنین است، معادله شعاعی شرودینگر به صورت زیردرمی آید

$$\frac{d^2}{dr^2}R + 2\mu E R \approx 0. \tag{16}$$

برای وقتی که r خیلی بزرگ باشد، جواب این معادله برابر است با

$$R(r) \approx e^{-\kappa\ r} \tag{17}$$

ویا

$$f(r) \approx \frac{e^{-\kappa\ r}}{r} \tag{18}$$

که درآن $\kappa = \sqrt{2\mu|E|}$. برای انرژی های مثبت $E > 0$ که حالت ها مقید نیستند بدنبال جواب های بهنجارنیستیم. دراین صورت تابع موج درr های بزرگ به صورت زیررفتارمی کند

$$R(r) \approx e^{ikr} + Ae^{-ikr}, \tag{19}$$

ویا

$$f(r) \approx \frac{e^{ikr} + Ae^{-ikr}}{r}, \tag{20}$$

که درآن $k = \sqrt{2\mu E}$.

پس ازاین ملاحظات کلی به مطالعه مثال های خاص می پردازیم.

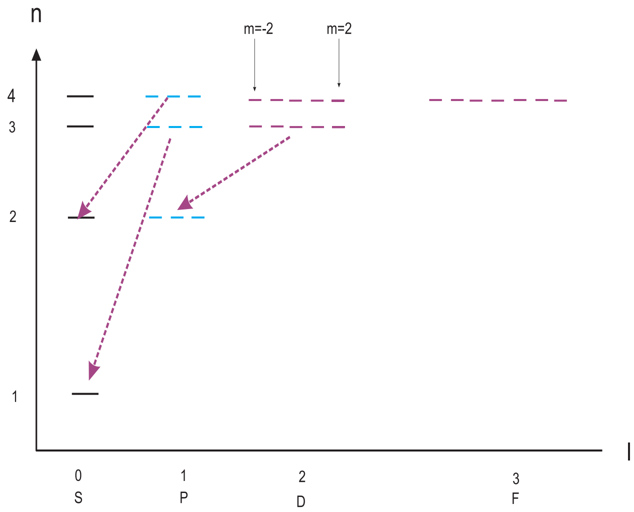
۳ ذره‌ی آزاد

هامیلتونی ذره آزاد به صورت $H = \frac{P^2}{2\mu}$ است. این هامیلتونی هم دارای تقارن انتقالی است و هم دارای تقارن دورانی، یعنی اینکه

$$[H, P_x] = [H, P_y] = [H, P_z] = 0, \tag{21}$$

ویا

$$[H, L_z] = [H, L^2] = 0. \tag{22}$$



شکل ۲: نمونه طیف انرژی برای پتانسیل های $V = Kr^2$ و $V = \frac{K}{r^2}$.

در درسهای گذشته به تقارن انتقالی این هامیلتونی توجه کردیم و در نتیجه ویژه حالت های عملگرهای تکانه خطی را بدست آوردیم که در عین حال ویژه حالت انرژی نیز هستند. می دانیم که این ویژه حالت ها به شکل زیرهستند:

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}, \tag{23}$$

که درآن $E = \frac{\hbar^2}{2m}k^2$. هرحلی ازاین نوع درواقع ویژه تابع مشترک سه عملگر P_x ، P_y و P_z است. درواقع تابع موج فوق چیزی نیست جز تصویر ویژه حالتِ $|\vec{k}\rangle$ در فضای مختصات، یعنی

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \langle\vec{r}|\vec{p}\rangle. \tag{24}$$

ازآنجایی که H برحسب P_x، P_y و P_z نوشته می شود حالتِ $|\vec{p}\rangle$ و یا تابع موج آن در فضا یعنی $\psi_{\vec{p}}(\vec{r})$ انرژی مشخصی دارند. تابع موجِ $\psi_{\vec{p}}(\vec{r})$ درواقع نشان دهنده یک موج تخت است که با بردار موج $\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$ مشخص می شود. این ویژه حالت ها به صورت زیر بهنجارهستند:

$$\langle\vec{p}|\vec{p'}\rangle = \delta^3(\vec{p} - \vec{p'}), \tag{25}$$

ویا

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3r \psi^*_{\vec{p}}(\vec{r}) \psi_{\vec{p'}}(\vec{r}) = \delta^3(\vec{p} - \vec{p'}). \tag{26}$$

بنابراین می توانیم بجای ویژه حالت های مشترک تکانه های خطی حالت هایی را بیابیم که ویژه حالت مشترکِ H، L^2 و L_z باشند. این ویژه حالت ها را با $|E, l, m\rangle$ و توابع موج آنها را درفضای مختصات با $\psi_{E,l,m}(\vec{r}) = \psi_{E,l,m}(r, \theta, \phi)$ نشان می

دهیم. هم ویژه حالت های $\langle\vec{k}|$ و هم ویژه حالت های $\langle E,l,m|$ تشکیل پایه برای فضای هیلبرت یک ذره آزاد می دهند و هردو به یکسان معتبر هستندو پیدایش و استفاده از آنها بستگی به شرایط بیرونی دارد، همچنانکه دریک استخر یا برکه آب هم امواج تخت می توان ایجاد کرد و هم امواج دایره ای که به صورت دایره های هم مرکز به یک نقطه نزدیک و یا ازآن دورمی شوند.

دراین درس به تقارن دورانی هامیلتونی توجه می کنیم و ویژه حالت های مشترک H ، L^2 و L_z را به طریقی که در درس گذشته شرح دادهایم پیدا می کنیم. برای این کار کافی است که معادله شعاعی شرودینگر را برای پتانسیل $V(r)=0$ حل کنیم.

این معادله به شکل زیراست که در آن تابع موج را با R_l نشان دادهایم زیرا معادله دیفرانسیل به l بستگی دارد.

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2\ R_l}{dr^2}+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}R_l=ER_l. \tag{27}$$

با انتخاب ِمتغیر بدون بعدِ x با تعریف ِ$x=kr$ که درآن $k=\sqrt{\frac{\hbar^2}{2\mu E}}$ به رابطه زیر می رسیم:

$$\frac{d^2\ R_l}{dx^2}-\frac{l(l+1)}{x^2}R_l=-R_l. \tag{28}$$

حل منظم این معادله را می توان با نوشتن تابع R_l به صورت $R_l(x)=x^l\sum_{n=0}^{\infty}c_nx^n$ و حل نامنظم آن را با نوشتن تابع R به صورت $R(x)=x^{-l-1}\sum_{n=0}^{\infty}c_nx^n$ وجایگذاری آنها درمعادله بالا بدست آورد.

تمرین: معادله دیفرانسیل 28 را به روش سری حل کنید و نشان دهید که انرژی های ذرهی آزاد هر مقداری می توانند داشته باشند. رابطه تکرار بین ضرایب c_n را بدست آورید. شکل نهایی تابع موج را که دارای انرژی E و تکانهی زاویهای l است به صورت یک سری بنویسید.

برای ذره آزاد می توان ازیک روش جبری ساده وزیبانیزکمک گرفت که آموزنده است. در ادامه این روش را توضیح می دهیم.

نخست دقت می کنیم که معادله 28 را می توان به صورت زیرنیزنوشت:

$$D_lR_l=-R_l, \tag{29}$$

که درآن D_l عملگردیفرانسیل زیراست

$$D_l:=\frac{d^2}{dx^2}-\frac{l(l+1)}{x^2} \tag{30}$$

این عملگر یادآور هامیلتونی نوسانگر هارمونیک است و بنابراین شاید بتوانیم با روشی شبیه به نوسانگر این مسئله را نیز به طریق جبری حل کنیم: برای این کار عملگرهای زیر را تعریف می کنیم:

$$d_l := \frac{d}{dx} + \frac{l+1}{x}, \qquad d_l^\dagger = -\frac{d}{dx} + \frac{l+1}{x}. \tag{31}$$

تمرین: نشان دهید که

$$d_l d_l^\dagger = -\frac{d^2}{dx^2} + \frac{l(l+1)}{x^2} = D_l, \qquad d_l^\dagger d_l = d_{l+1} d_{l+1}^\dagger = D_{l+1}. \tag{32}$$

حال فرض کنید که R_l جوابی از معادله شرودینگر برای تکانه زوایه ای l باشد یعنی

$$D_l R_l = -R_l \qquad \text{یا} \qquad d_l d_l^\dagger R_l = -R_l. \tag{33}$$

دراین صورت عملگر $d_l^\dagger$ را روی طرفین ازچپ اثرمی دهیم:

$$d_l^\dagger (d_l d_l^\dagger) R_l = -d_l^\dagger R_l \longrightarrow D_{l+1}(d_l^\dagger) = -d_l^\dagger R_l \tag{34}$$

بنابراین $d_l^\dagger R_l$ جواب معادله شرودینگر برای تکانه زاویه ای $l+1$ خواهد بود. این رابطه را به شکل زیرمی نویسیم

$$R_{l+1} = d_l^\dagger R_l. \tag{35}$$

هم چنین اگرروی طرفین رابطه‌بالا عملگر d_l را اثردهیم وازرابطه 33 استفاده کنیم بدست می آوریم

$$d_l R_{l+1} = d_l d_l^\dagger R_l = D_l R_l = -R_l, \tag{36}$$

بنابراین مشابه با رابطه 35 رابطه زیر را داریم

$$R_l = -d_l R_{l+1}. \tag{37}$$

روابط 35 و 37 نشان می دهند که باداشتن یک جواب برای تکانه زاویه ای $l = 0$ می توان همه جواب های دیگر را برای تکانه های زاویه ای دلخواه بدست آورد. بنابراین دراین جا جواب برای تکانه زاویه ای صفر را بدست می آوریم. برای $l = 0$ دو جواب داریم که عبارتند از

$$R_0 = \sin x \qquad \longrightarrow \qquad f_0(x) = j_0(x) = \frac{\sin x}{x}$$

یا

$$R_0 = -\cos x \qquad \longrightarrow \qquad f_0(x) = n_0(x) = -\frac{\cos x}{x}$$

. علامت − صرفاً ازروی قرارداد نوشته شده است. بااثر متوالی عملگرهای $d_0^\dagger$ $d_1^\dagger$ ، $d_2^\dagger$ و $\cdots$ می توان تمام توابع u_l را بدست آورد. برای این که این کاررا به طریق فشرده ای انجام دهیم به رابطه زیردقت می کنیم

$$R_{l+1} = \left(-\frac{d}{dx} + \frac{l+1}{x}\right) R_l \tag{38}$$

شاید بتوان بابازتعریف تابع R کاری کرد که عملگردیفرانسیل طرف راست بستگی به l نداشته باشد. اگر موفق به این کارشویم می توانیم براحتی تمام توابع را به صورت توانی از یک عملگر که روی یک تابع اثرمی کند بنویسیم. برای بازتعریف تابع R قرارمی دهیم $R_l(x) = x^{\alpha_l} F_l(x)$.

تمرین: نشان دهید که اگر α_l را برابر با $l+1$ بگیریم، یعنی اگر قرار دهیم

$$R_l(x) = x^{l+1} F_l(x), \tag{39}$$

آنگاه معادله تکرار برای F_l شکل ساده زیر را به خود می گیرد:

$$F_{l+1} = \left(-\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right) F_l. \tag{40}$$

درنتیجه خواهیم داشت

$$F_l = \left(-\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^l F_0, \tag{41}$$

ویا

$$R_l = x^{l+1} \left(-\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^l \frac{R_0}{x}. \tag{42}$$

با توجه به رابطه‌ی $f_l(r) := \frac{R_l(r)}{r}$ بدست می آوریم

$$f_l(x) = x^l \left(-\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^l f_0. \tag{43}$$

بسته به اینکه f_0 را کدام جواب بگیریم دو دسته جواب برای تابع موج شعاعی $f_l(x)$ به دست می آید که عبارتند از

$$f_l(x) \quad = \quad x^l \left(-\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^l \frac{\sin x}{x} =: j_l(x)$$

$$f_l(x) = x^l \left(-\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^l \frac{-\cos x}{x} =: n_l(x). \tag{44}$$

این جواب ها توابع بسل کروی از نوع اول و دوم نامیده می شوند.

تمرین: نشان دهید که چند تابع اولیه بسل کروی به شکل زیرهستند:

$$\begin{aligned} j_0(x) &= \frac{\sin x}{x} & n_0(x) &= -\frac{\cos x}{x} \\ j_1(x) &= \frac{\sin(x)}{x^2} - \frac{\cos x}{x} & n_1(x) &= -\frac{\cos x}{x^2} - \frac{\cos x}{x} \\ j_2(x) &= (\frac{3}{x^2} - \frac{1}{x})\sin x - 3\frac{\cos x}{x^2}, & n_2(x) &= -(\frac{3}{x^2} - \frac{1}{x})\cos x - \frac{3\sin x}{x^2}. \end{aligned} \tag{45}$$

تمرین: یک الکترون با جرم $m = 9.11 \times 10^{-31}\ Kg$ در چاه پتانسیل کروی به شعاع دوآنگستروم قرار دارد. تابع موج حالت پایه را بدست آورید. این تابع موج را بهنجار کنید. مقدار متوسط $\sqrt{\langle R^2 \rangle}$ را برحسب آنگستروم محاسبه کنید. انرژی اولین حالت برانگیخته را حساب کنید. واگنی آن را نیز تعیین کنید.

تمرین: در مسئله قبل فرض کنید که الکترون بین دو پوسته کروی به شعاع های ۲ و ۱ آنگستروم قرار دارد. حال به سوال های طرح شده در مسئله قبلی دوباره پاسخ دهید.

برای بعضی از کاربردها به ترکیبی از توابع بسل علاقه داریم که توابع هنکل $Hankel$ نامیده می شود و عبارتند از

$$\begin{aligned} h_l^{(+)}(x) &= j_l(x) + in_l(x), \\ h_l^{(-)}(x) &= j_l(x) - in_l(x). \end{aligned} \tag{46}$$

چند تابع اولیه هنکل به شکل زیرهستند:

$$\begin{aligned} h_0^{(+)}(x) &= \frac{e^{ix}}{ix} \\ h_1^{(-)}(x) &= -\frac{e^{ix}}{x}(1 + \frac{i}{x}) \\ h_2^{(+)}(x) &= \frac{ie^{ix}}{x}\left(1 + \frac{3i}{x} - \frac{3}{x^2}\right). \end{aligned} \tag{47}$$

تمرین: بااستفاده از روابط 44 نشان دهید که توابع بسل کروی برای x های کوچک به صورت زیر رفتار می کنند:

$$j_l(x) \approx \frac{x^l}{(2l+1)!!} \tag{48}$$

و

$$n_l(x) \approx -\frac{(2l-1)!!}{x^l}. \tag{49}$$

می توان ثابت کرد که برای x های بزرگ توابع بسل رفتارمجانبی زیر را دارند:

$$j_l(x) \approx \frac{1}{x}\sin(x-\frac{l\pi}{2})$$
$$n_l(x) \approx -\frac{1}{x}\cos(x-\frac{l\pi}{2}). \tag{50}$$

درنتیجه تابع هنکل کروی برای x های بزرگ به شکل زیررفتارمی کند:

$$h_l^{(+)}(x) \approx \frac{1}{x}e^{ix} \qquad h_l^{(-)}(x) \approx \frac{-1}{x}e^{-ix}. \tag{51}$$

بنابراین ویژه توابع انرژی ذره آزاد که دارای تکانه زاویه ای مشخص نیز باشند به شکل زیر هستند:

$$\psi^{(1)}_{E,l,m}(r,\theta,\phi) = j_l(kr)Y_{l,m}(\theta,\phi),$$
$$\psi^{(2)}_{E,l,m}(r,\theta,\phi) = n_l(kr)Y_{l,m}(\theta,\phi). \tag{52}$$

ویا به شکل زیر:

$$\psi^{+}_{E,l,m}(r,\theta,\phi) = h_l^{(+)}(kr)Y_{l,m}(\theta,\phi),$$
$$\psi^{-}_{E,l,m}(r,\theta,\phi) = h_l^{(-)}(kr)Y_{l,m}(\theta,\phi). \tag{53}$$

دقت کنید که تابع $\psi^{(2)}_{E,l,m}$ در $r=0$ واگراست . با توجه به بسط مجانبی 51، برای r های بزرگ توابع $\psi^{+}_{E,l,m}$ و $\psi^{-}_{E,l,m}$ به شکل زیر رفتار می کنند: برای r های بزرگ این تابع به شکل زیررفتارمی کند

$$\psi^{(+)}_{E,l,m}(r,\theta,\phi) = \frac{e^{ikr}}{kr}Y_{l,m}(\theta,\phi)$$
$$\psi^{(-)}_{E,l,m}(r,\theta,\phi) = \frac{-e^{-ikr}}{kr}Y_{l,m}(\theta,\phi). \tag{54}$$

هرگاه تحول زمانی این توابع موج را نیز درنظربگیریم که با ضرب کردن جمله e^{-iEt} درآن ها بدست می آید، درمی یابیم که تابع موج $\psi^{(+)}_{E,l,m}$ نشان دهنده یک موج کروی است که از مرکز دور می شود و تابع موج $\psi^{(-)}_{E,l,m}$ نشان دهنده یک موج کروی است که به مرکز نزدیک می شود.

۱.۳ رابطه امواج تخت و امواج کروی

حال که شکل صریح توابع موج کروی را بدست آورده ایم می توانیم به بحث خود درباره بسط امواج تخت بر حسب امواج کروی بازگردیم. بنابر رابطه (??) داریم

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} C(\vec{k},l,m)\psi_{E,l,m}(r,\theta,\phi) \tag{55}$$

که درآن

$$C(\vec{k},l,m) := \langle E,l,m|\vec{k}\rangle. \tag{56}$$

فرض کنید که موج تخت در راستای محور z حرکت می کند، یعنی $\vec{k}=k\hat{z}$، در حقیقت همواره می توانیم با انتخاب محورهای مختصات کاری کنیم که محور z بر بردار موج $\vec{k}$ منطبق شود. دراین صورت می توانیم نشان دهیم که ضرایب $C(k\hat{z},l,m)$ تنها برای m های برابر با صفر مقدار دارند و برای بقیه m ها مساوی با صفر هستند. برای درک این نکته عنصر ماتریسی $\langle E,l,m|L_z|k\hat{z}\rangle$ را از دو طریق حساب می کنیم. با اثر L_z روی بردار سمت چپ بدست می آوریم که

$$\langle E,l,m|L_z|k\hat{z}\rangle = m\langle E,l,m|L_z|k\hat{z}\rangle, \tag{57}$$

و با اثر $L_z = xP_y - yP_x$ روی بردار سمت راست که مولفه‌های تکانه‌اش در راستاهای x و y صفر هستند، بدست می آوریم که

$$\langle E,l,m|L_z|k\hat{z}\rangle = 0. \tag{58}$$

بنابراین بسط به شکل زیر درمی آید:

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} C_l j_l(kr) Y_{l,0}(\theta,\phi), \tag{59}$$

دقت کنید که $\langle \mathbf{r}|k\mathbf{z}\rangle$ را به صورت e^{ikz} نوشته‌ایم و برای سادگی از ضریب $\frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}$ صرف نظر کرده‌ایم.

دراین جا به دو نکته باید اشاره کنیم. اول آنکه درطرف راست فقط جواب های منظم دربسط آورده شده اند. دلیل این امر آن است که طرف چپ در $r=0$ مقدارمتناهی دارد و درطرف راست نمی بایست توابعی که در $r=0$ نامتناهی اند وجود داشته باشند. دوم آنکه ضرایب را به جای $C(k\vec{z},l,0)$ به شکل ساده تر C_l نوشته ایم که درآن پارامتر k که درهردو طرف بسط یکسان است دیگر وجود ندارد. در تمرین های این درس نشان می دهید که ضرایب بسط عبارت اند از:

$$C_l = i^l\sqrt{4\pi(2l+1)}. \tag{60}$$

هرگاه به این مسئله دقت کنیم که

$$Y_{l,0}(\theta,\phi) = \left(\frac{2l+1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} P_l(\cos\theta), \tag{61}$$

که درآن $P_l(\cos\theta)$ تابع لژانداراست، به بسط زیر می رسیم که دردرس های آینده ازآن استفاده خواهیم کرد:

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l(2l+1)j_l(kr)p_l(\cos\theta). \tag{62}$$

۴ چاه پتانسیل کروی

ذره ای تصور کنیم که درپتانسیل زیر گیر افتاده است:

$$V(r) = \begin{cases} 0 & r\le a, \\ \infty & a\le r, \end{cases} \tag{63}$$

هرگاه بخواهیم ترازهای انرژی یک ذره درچنین پتانسیلی را بدست آوریم می بایست معادله شرودینگر را برای ذره آزاد درون چاه حل کنیم و سپس شرط مرزی $\psi_{E,l,m}(r=a)=0$
را اعمال کنیم. می دانیم که تابع موج شعاعی در درون چاه عبارت است از:

$$R(r) = j_l(kr) \tag{64}$$

یادآوری می کنیم که تابع موج $n_l(kr)$ در مبدأ نامنظم است و بنابراین یک جواب مجازنیست. حال شرط صفربودن تابع موج منجر به شرط زیر می شود

$$j_l(ka) = 0. \tag{65}$$

هرگاه n ام این صفر تابع بسل j_l را با $x_{l,n}$ نمایش دهیم خواهیم داشت :

$$ka = x_{l,n} \tag{66}$$

ودرنتیجه ترازهای انرژی به شکل زیرخواهند بود:

$$E_{n,l} = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} = \frac{\hbar^2 x_{l,n}^2}{2\mu a^2}. \tag{67}$$

همانطور که ازتقارن انتقالی انتظار داریم ترازهای انرژی واگن هستند و انرژی تنها به دو عدد کوانتومی l و n بستگی دارند و مستقل از m هستند.

۵ نوسانگر هارمونیک همسانگرد

پتانسیل موثر برای نوسانگر هارمونیک همسانگرد به شکل زیراست:

$$V_{eff} = \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2 + \frac{l(l+1)}{2\mu r^2} \tag{68}$$

مطابق معمول ویژه حالت های انرژی به شکل زیر خواهند بود:

$$\psi_{E,l,m} = \frac{R_{E,l}(r)}{r} Y_{l,m}(\theta, \phi). \tag{69}$$

که درآن $R_{E,l}$ یعنی تابع موج شعاعی در معادله شعاعی شرودینگرِ یعنی معادله زیر صدق می کند

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}\right] R(r) = ER(r). \tag{70}$$

جزییات حل این معادله دیفرانسیل را به عهده خواننده می گذاریم. دراینجا تنها به مراحل کلی حل آن که برای مسائل دیگر نیز صادق است اشاره می کنیم:

مرحله اول: پارامترهای مسئله را با پارامترهای بدون بعد جایگزین می کنیم. برای این کار می توانیم از تجزیه تحلیل ابعادی استفاده کنیم. بنابراین قرار می دهیم

$$r = (\frac{\hbar}{\mu\omega})^{\frac{1}{2}} x \tag{71}$$

و

$$E = \hbar\omega\lambda. \tag{72}$$

این انتخاب ها کاملاً طبیعی هستند زیرا $\hbar\omega$ و $\sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}}$ تنها کمیت هایی هستند با بعد انرژی و طول که درمسئله نوسانگر هارمونیک وجود دارند. دقت کنید که x و λ بدون بعد هستند. با این انتخاب ها معادله شعاعی به شکل زیردرمی آید:

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2} + x^2 + \frac{l(l+1)}{x^2}\right] R(x) = 2\lambda R(x). \tag{73}$$

مرحله دوم: به رفتار معادله برای x های بزرگ نگاه می کنیم. دراین حد داریم

$$-\frac{d^2 R}{dx^2} + x^2 R(x) \approx 0 \tag{74}$$

که یک حل بهنجار ازآن به شکل زیر است:

$$R(x) \approx e^{-\frac{1}{2}x^2} \tag{75}$$

مرحله سوم: قرار می دهیم $R(x) = e^{-\frac{1}{2}x^2} u(x)$ و معادله حاکم بر u را بدست می آوریم که به شکل زیراست:

$$u'' - 2xu' + (2\lambda - 1 - \frac{l(l+1)}{x^2})u = 0. \tag{76}$$

مرحله چهارم: حال $u(x)$ را به صورت زیر بسط می دهیم

$$u(x) = x^{l+1} \sum_{k=0}^{\infty} C_k x^k \tag{77}$$

و یک رابطه تکرار برای C_k ها بدست می آوریم. این رابطه تکرار را برای k های بزرگ نگاه می کنیم تا رفتار مجانبی تابع u را بفهمیم. نتیجه‌ای که می گیریم آن است که اگر این سری درجایی قطع نشود رفتار مجانبی تابع $u(x)$ چنان خواهد بود که تابع $R(x) = e^{-\frac{1}{2}x^2} u(x)$ دربی نهایت به سمت صفر میل نخواهد کرد. بنابراین سری مربوطه می بایست درجایی قطع شود. قطع شدن سری به رابطه زیر منجر می شود:

$$\lambda = (2k + l + \frac{3}{2}), \quad k = 0,\ 1,\ 2,\ \cdots. \tag{78}$$

ویا

$$E = (2k + l + \frac{3}{2})\hbar\omega, \quad k = 0,\ 1,\ 2,\ \cdots. \tag{79}$$

با تعریف n به صورت زیر

$$n = 2k + l, \tag{80}$$

نتیجه می گیریم که انرژی به صورت زیر خواهد بود:

$$E = (n + \frac{3}{2})\hbar\omega. \tag{81}$$

به این ترتیب انرژی نوسانگر هارمونیک تنها به یک عدد کوانتومی یعنی n که آن را عدد کوانتومی اصلی می خوانیم بستگی پیدامی کند. با توجه به روابط 78 و 80 نتیجه می گیریم که به ازای هرعدد کوانتومی اصلی n یک مجموعه از تراز های واگن با l های مختلف وجود دارند که همگی یک انرژی دارند. عدد کوانتومی l برای هرترازِ n مقادیر زیر را اختیار می کند:

$$l = n,\ n-2,\ n-4, \cdots 1, \quad \text{یا}, \quad 0. \tag{82}$$

تمرین: برای وقتی که $l = 0$ است انرژی های نوسانگر هارمونیک چه مقدارهایی می توانند داشته باشند؟ برای وقتی که $l = 1$ است چه مقادیر انرژی مجازهستند؟ در یک دیاگرام مشابه شکل ۲ سطوح انرژی نوسانگر هارمونیک را رسم کنید.

تمرین: تابع موج نوسانگر هارمونیک سه بعدی را برای $n = 2$ و $l = 0$ بدست آورید.

تمرین: تابع موج نوسانگر هارمونیک سه بعدی را برای $n = 1$ $l = 1$ و $m = 0$ بدست آورید.

تمرین: تابع موج نوسانگر هارمونیک سه بعدی را برای $n = 3$ و $l = 1$ و $m = 1$ بدست آورید. حساب کنید وقتی نوسانگر در این حالت است به طور متوسط فاصله آن از مبداء چقدر است؟

تمرین: یک نوسانگر هارمونیک همسانگرد با فرکانس $\omega = 10^15 Hz$ و جرم 10^{-27Kg} در نظر بگیرید. حساب کنید که بین انرژی های 10 و 12 الکترون ولت چند تا تراز انرژی وجود دارد؟

تمرین: یک نوسانگر هارمونیک همسانگرد و ویژه حالت های انرژی آن به صورت $|n_1, n_2, n_3\rangle$ را در نظر بگیرید. دراین جا n_1 ، n_2 و n_3 ویژه مقدارهای عملگرهای شمارش $a_1^\dagger a_1$، $a_2^\dagger a_2$ و $a_3^\dagger a_3$ هستند که در آن عملگرهای a_i و $a_i^\dagger$ با استفاده از عملگرهای مکان و تکانه‌ی X_i و P_i ساخته شده‌اند. اثر عملگرهای تکانه‌ی زاویه‌ای L_x ، L_y و L_z را روی ویژه حالت های انرژی بدست آورید و نتیجه خود را با توجه به تقارن دورانی این مسئله معنا کنید.