Mechanika Kwantowa dla doktorantów

zestaw 24 na dzień 25.4.2013 czwartek 8:30

zestaw 25 na dzień 2.5.2013

sala na antresoli 431

1. Proszę przygotować symulację numeryczną propagatora oscylatora harmonicznego metodą Metropolisa.

2. Posługując się wzorem na $f^{(1)}(\theta)$ dla przybliżenia Borna dla potencjału Yukawy:

$$V(r) = V_0 \frac{e^{-\mu r}}{\mu r}$$

i zakładając, że przesunięcia fazowe $|\delta_l| \ll 1$, wyprowadzić wzór na δ_l wyrażony poprzez funkcje Legendre'a $Q_l(\zeta)$ zdefiniowane jako

$$Q_l(\zeta) = \frac{1}{2} \int_{-1}^{1} d\zeta' \frac{P_l(\zeta')}{\zeta - \zeta'}.$$

Wykazać, że Q_l są rozwiązaniami r. Legendre'a. Proszę wyprowadzić rozwinięcie dla $|\zeta| > 1$

$$\begin{aligned} Q_l(\zeta) = & \frac{l!}{1 \cdot 3 \ldots (2l+1)} \\ & \times \left\{ \frac{1}{\zeta^{l+1}} + \frac{(l+1)(l+2)}{2 \cdot (2l+3)} \frac{1}{\zeta^{l+3}} + \frac{(l+1)(l+2)(l+3)(l+4)}{2 \cdot 4 \cdot (2l+3)(2l+5)} \frac{1}{\zeta^{l+5}} + \ldots \right\} \end{aligned} \quad (1)$$

Korzystając z (1) proszę udowodnić, że

(a) δ_l jest ujemne (dodatnie) gdy potencjał jest przyciągający (odpychający), t.j. $V_0 < 0$ ($V_0 > 0$);

(b) dla fali de Broglie'a znacznie „dłuższej" niż zasięg potencjału

$$\delta_l = \text{const} \times k^{2l+1}.$$

(c) Znaleźć wzór na współczynnik proporcjonalności const.

3. Proszę rozważyć radialne równanie Schrödingera w potencjale $V(r) \to 0$ dla $r \to \infty$ dla energii $E = \hbar^2 k^2/(2m) > 0$ przyjmując, że funkcja falowa separuje się na część kątową i radialną

$$\psi_{klm}(\vec{r}) = R_{kl}(r) Y_l^m(\vartheta, \varphi).$$

Dla dużych r (lub dla cząstki swobodnej) gdy potencjał znika, równanie to jest znane jako zmodyfikowane równanie Bessela. Rozwiązać to równanie dla $l = 0$ definiując nową funkcję $u(r) = r\, R_{k0}(r)$.

Aby rozwiązać to równanie dla $l \neq 0$ należy

- zdefiniować $\chi_{kl}(r) = R_{kl}(r)/r^l$ i wyprowadzić równanie na $\chi_{kl}(r)$,
- zróżniczkować to równanie po r,
- zdefiniować nową funkcję $f_{kl}(r) = r\,\chi'_{kl}(r)$,
- porównać równanie na f_{kl} z wyjściowym równaniem na χ_{kl} i zgadnąć wzór rekurencyjny łączący χ_{kl+1} z χ_{kl},
- rozwiązać rekurencję i znaleźć $R_{kl}(r)$ dla $l = 1, 2$, etc.,
- znaleźć asymptotykę $R_{kl}(r)$ dla dużych r,
- startując z wyjściowego równania na $R_{kl}(r)$ znaleźć zachowanie w zerze.

4. (Zadanie na 2.5. Ze względu na godziny Rektorskie, zadanie to proszę zrobić na osobnych kartkach i dostarczyć na następnych ćwiczeniach.)

   Załóżmy, że umiemy rozwiązać równanie radialne dla centralnego potencjału $V(r)$ o skończonym zasięgu R. Rozwiązanie to, dla $E = \hbar^2k^2/2m > 0$ można zapisać ogólnie jako
   $$\sum_l (2l+1)i^l A_l(r) P_l(\cos\vartheta), \tag{2}$$
   gdzie $A_l(r)$ jest w związku z tym znaną funkcją. Pokazać, że przesunięcie fazowe daje się wyliczyć ze wzoru:
   $$\tan\delta_l = \frac{kR\,j'_l(kR) - \beta_l\,j_l(kR)}{kR\,y'_l(kR) - \beta_l\,y_l(kR)}$$
   gdzie j_l oraz y_l są sferycznymi funkcjami Bessela.

   WSKAZÓWKA

   Funkcja falowa w problemie rozproszeniowym (rozproszenie elastyczne) ma asymptotykę
   $$\psi \to e^{ikz} + f(\theta)\,\frac{e^{ikr}}{r}.$$
   Rozkładając falę płaską (udowodnić!)
   $$e^{ikz} = \sum_l (2l+1)i^l j_l(kr) P_l(\cos\theta)$$
   i amplitudę
   $$f(\theta) = \sum_l (2l+1) f_l(\theta) P_l(\cos\theta)$$
   na fale parcjalne można znaleźć asymptotyczą formę funkcji falowej korzystając ze znanej asymptotyki funkcji Bessela. Współczynnik przy wychodzącej fali kulistej e^{ikr} oznaczany jako
   $$S_l = e^{2i\delta_l}$$

definiuje przesunięcie fazowe.

Jeżeli znamy funkcję falową to znamy A_l ze wzoru (2). Rozkładając A_l w bazie funkcji j_l oraz y_l można pokazać, że

$$A_l(r) = e^{i\delta_l(k)} \left[j_l(kr) \cos\delta_l(k) - y_l(kr) \sin\delta_l(k) \right].$$

Szukane przesunięcie fazowe wyliczamy, konstruując wielkość β_l zdefiniowaną jako

$$\beta_l = \left. \frac{r}{A_l} \frac{dA_l}{dr} \right|_{r=R}$$

gdzie R jest dowolnym punktem „daleko” od centrum potencjału. Dla skończonej studni można wybrać R jako rozmiar studni.