7. zadaća iz Kvantne fizike

29. ožujka 2010.

Zadatak 1

Ako radijalni integral pri izvodu Greenove funkcije zamijenite Cauchyjevom principalnom vrijednošću, pokažite da Greenova funkcija ima oblik: $G(\vec{r}) = \frac{\cos(kr)}{r}$.

Greenova funkcija rješenje je jednadžbe:

$$(\nabla^2 + k^2) G(\vec{r}) = +4\pi\,\delta(\vec{r}) \qquad (1) \qquad , \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

(odabir konstante $+4\pi$ zapravo je proizvoljan, drugi odabir vodi na isto rješenje do na konstantu).

Rješavamo Fourierovim transformatom:

$$G(\vec{r}) = \int d^3s\, e^{i\vec{s}\cdot\vec{r}} g(\vec{s}) \qquad (2)$$

$$\nabla^2 G(\vec{r}) = -\int d^3s\, e^{i\vec{s}\cdot\vec{r}}\, \vec{s}^{\,2} g(\vec{s}) \qquad (3)$$

$$\delta(\vec{r}) = \int d^3s\, \frac{e^{i\vec{s}\cdot\vec{r}}}{(2\pi)^3} \qquad (4)$$

Uvrstimo (2), (3), (4) u (1):

$$\Rightarrow \int d^3s\, e^{i\vec{s}\cdot\vec{r}} \left[(-\vec{s}^{\,2} + k^2) g(\vec{s}) - \frac{1}{2\pi^2} \right] = 0$$

$$\Rightarrow \quad g(\vec{s}) = \frac{-1}{2\pi^2(\vec{s}^2 - k^2)} \qquad (5)$$

Uvrstimo (5) u definicioni integral (2) za Greenovu funkciju:

$$G(\vec{r}) = \frac{-1}{2\pi^2} \int d^3s \, \frac{e^{i\vec{s}\cdot\vec{r}}}{\vec{s}^2 - k^2} \qquad (6)$$

Koordinatni sistem u kojem integriramo izaberemo takav da mu se z-os poklapa sa $\vec{r}$. Izintegriramo po angularnim koordinatama:

$$G(\vec{r}) = \frac{-1}{2\pi^2} \int_0^\infty ds \int_0^\pi d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi \, s^2 \sin\vartheta \, \frac{e^{irs\cos\vartheta}}{s^2 - k^2} =$$

$$= \frac{-1}{\pi} \int_0^\infty ds \int_0^\pi d\vartheta \, s^2 \sin\vartheta \, \frac{e^{irs\cos\vartheta}}{s^2 - k^2} = \quad \left\{ \begin{array}{l} w = \cos\vartheta \\ dw = -\sin\vartheta \, d\vartheta \end{array} \right.$$

$$= \frac{-1}{\pi} \int_0^\infty ds \int_{-1}^1 dw \, s^2 \, \frac{e^{irsw}}{s^2 - k^2} =$$

$$= \frac{-2}{\pi r} \int_0^\infty ds \, \frac{s \sin(rs)}{s^2 - k^2} \qquad (7)$$

radijalni integral

Integraciju u (7) možemo proširiti do $-\infty$ jer je podintegralna funkcija parna:

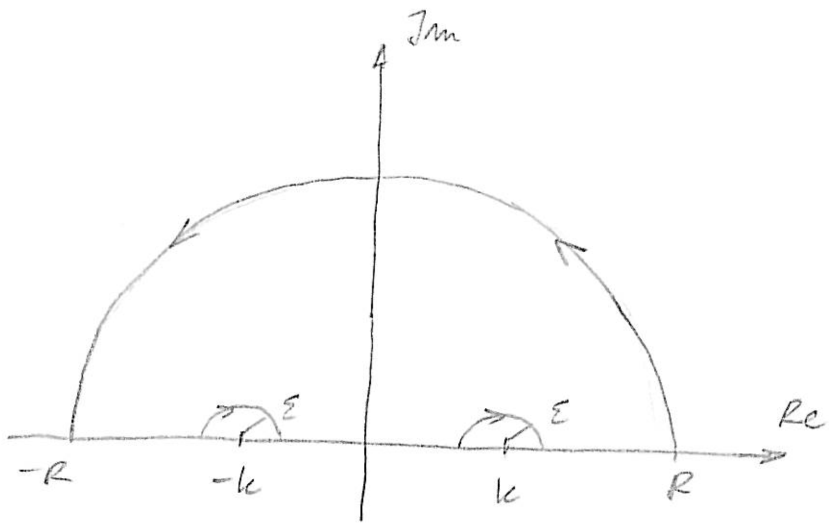
$$G(\vec{r}) = \frac{-1}{\pi r} \int_{-\infty}^\infty ds \, \frac{s \sin(rs)}{s^2 - k^2} \qquad (8)$$

U (8) možemo dodati integral po neparnoj funkciji (dodamo nula):

$$G(\vec{r}) = \frac{-1}{\pi r}\int_{-\infty}^{\infty} ds \, \frac{s \sin(rs)}{s^2 - k^2} + \frac{i}{\pi r}\int_{-\infty}^{\infty} ds \, \frac{s \cos(rs)}{s^2-k^2} =$$

$$= + \frac{i}{\pi r}\int_{-\infty}^{\infty} ds \, \frac{s\, e^{irs}}{s^2-k^2} \qquad (9)$$

Integriramo (9) u kompleksnoj ravnini. Polove prvog reda imamo u $s = \pm k$ i njih polukružno zaobiđemo kao na slici:



$R \to \infty$
$\varepsilon \to 0$

Lako se vidi da integral po velikoj polukružnici iščezava za $R \to \infty$. Integrali po malim kružnicama su $\frac{1}{2}$ doprinosa od polova koji su unutar, a ne na krivulji integracije (Arfken). Takva integracija odgovara Cauchyjevoj principalnoj vrijednosti.

$$\mathrm{Res}(-k) = \lim_{s\to -k}\left[\cancel{(s+k)}\frac{s\,e^{irs}}{\cancel{(s+k)}(s-k)}\right] = \frac{1}{2}e^{-ikr}$$

$$\mathrm{Res}(k) = \lim_{s\to k}\left[\cancel{(s-k)}\frac{s\,e^{irs}}{(s+k)\cancel{(s-k)}}\right] = \frac{1}{2}e^{ikr}$$

$$\Rightarrow\quad G(\vec{r}) = \frac{i}{\pi r}(-\pi i)\Big(\mathrm{Res}(-k)+\mathrm{Res}(k)\Big) =$$

$$= \frac{1}{2r}\left(e^{ikr}+e^{-ikr}\right) = \underline{\underline{\frac{\cos(kr)}{r}}}$$

Zadatak 2

Ako integralni oblik Schrödingerove jednadžbe glasi:

$$\psi(x) = \psi_0(x) - \frac{im}{\hbar^2 k}\int_{-\infty}^{\infty} e^{ik|x-x_0|}V(x_0)\psi(x_0)\,dx_0, \qquad (1)$$

izvedite izraz za koeficijent refleksije u Bornovoj aproksimaciji. (Uputa: promatrati valnu funkciju u limesu $x\to-\infty$). Koristeći dobiveni izraz izračunajte koeficijent transmisije ($T=1-R$) za raspršenje na konačnoj pravokutnoj jami te usporedite rezultat sa egzaktnim rješenjem.

Koeficijent refleksije definiran je kao omjer iznosa struje vjerojatnosti raspršenog vala u $x\to-\infty$ i struje vjerojatnosti upadnog vala.

Struja vjerojatnosti definirana je kao:

$$j(x) = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x}\right) \qquad (2)$$

Upadni val je ravni val:

$$\psi_0(x) = \mathcal{N} e^{ikx}, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad \Longrightarrow \quad j_u = |\mathcal{N}|^2 \frac{\hbar k}{m} \qquad (3)$$

Za raspršeni val imamo iz (1):

$$\psi_R(x) = \psi(x) - \psi_0(x) = -\frac{im}{\hbar^2 k}\int_{-\infty}^{\infty} e^{ik|x-x_0|} V(x_0)\psi(x_0)\,dx_0 \qquad (4)$$

U prvoj Bornovoj aproksimaciji imamo:

$$\psi(x_0) \approx \psi_0(x_0) = \mathcal{N} e^{ikx_0}$$

$$\Longrightarrow \psi_R(x) \approx -\frac{im}{\hbar^2 k}\int_{-\infty}^{\infty} e^{ik|x-x_0|} V(x_0)\, \mathcal{N} e^{ikx_0}\,dx_0 =$$

$$= -\mathcal{N}\frac{im}{\hbar^2 k} e^{ikx}\int_{-\infty}^{x} V(x_0)\,dx_0 - \mathcal{N}\frac{im}{\hbar^2 k} e^{-ikx}\int_{x}^{\infty} e^{2ikx_0} V(x_0)\,dx_0 \qquad (5)$$

Nađimo struju vjerojatnosti raspršenog vala.

$$\frac{\partial \psi_R}{\partial x} = \mathcal{N}\frac{m}{\hbar^2} e^{ikx}\int_{-\infty}^{x} V(x_0)\,dx_0 - \mathcal{N}\frac{m}{\hbar^2} e^{-ikx}\int_{x}^{\infty} e^{2ikx_0} V(x_0)\,dx_0 -$$

$$- \mathcal{N}\frac{im}{\hbar^2 k} e^{ikx}\frac{\partial}{\partial x}\int_{-\infty}^{x} V(x_0)\,dx_0 - \mathcal{N}\frac{im}{\hbar^2 k} e^{-ikx}\frac{\partial}{\partial x}\int_{x}^{\infty} e^{2ikx_0} V(x_0)\,dx_0 =$$

$$= \mathcal{N}\frac{m}{\hbar^2} e^{ikx}\int_{-\infty}^{x} V(x_0)\,dx_0 - \mathcal{N}\frac{m}{\hbar^2} e^{-ikx}\int_{x}^{\infty} e^{2ikx_0} V(x_0)\,dx_0 -$$

$$\cancel{- \mathcal{N}\frac{im}{\hbar^2 k} e^{ikx} V(x)} \cancel{+ \mathcal{N}\frac{im}{\hbar^2 k} e^{-ikx} e^{2ikx} V(x)} =$$

$$= \mathcal{N} \frac{m}{\hbar^2} \left(e^{ikx} \int_{-\infty}^{x} V(x_0) dx_0 - e^{-ikx} \int_{x}^{\infty} e^{2ikx_0} V(x_0) dx_0 \right) \tag{6}$$

Uvrstimo (5) i (6) u (2):

$$\Rightarrow j_R(x) = |\mathcal{N}|^2 \frac{m}{2\hbar^3 k} \Big[\left(e^{-ikx} \int_{-\infty}^{x} V(x_0) dx_0 + e^{ikx} \int_{x}^{\infty} e^{-2ikx_0} V(x_0) dx_0 \right) \times$$

$$\times \left(e^{ikx} \int_{-\infty}^{x} V(x_0) dx_0 - e^{-ikx} \int_{x}^{\infty} e^{2ikx_0} V(x_0) dx_0 \right) +$$

$$+ \left(e^{ikx} \int_{-\infty}^{x} V(x_0) dx_0 + e^{-ikx} \int_{x}^{\infty} e^{2ikx_0} V(x_0) dx_0 \right) \times$$

$$\times \left(e^{-ikx} \int_{-\infty}^{x} V(x_0) dx_0 - e^{ikx} \int_{x}^{\infty} e^{-2ikx_0} V(x_0) dx_0 \right) \Big] =$$

$$= |\mathcal{N}|^2 \frac{m}{\hbar^3 k} \left[\left(\int_{-\infty}^{x} V(x_0) dx_0 \right)^2 - \left| \int_{x}^{\infty} e^{2ikx_0} V(x_0) dx_0 \right|^2 \right] \tag{7}$$

Imamo za $x \to -\infty$: (potencijal iščezava u $-\infty$)

$$|j_R(x \to -\infty)| = |\mathcal{N}|^2 \frac{m}{\hbar^3 k} \left| \int_{-\infty}^{\infty} e^{2ikx_0} V(x_0) dx_0 \right|^2 \tag{8}$$

Omjer (8) i (3) je koeficijent refleksije:

$$R = \frac{|j_R(x \to -\infty)|}{|j_u|} = \left(\frac{m}{\hbar^2 k} \right)^2 \left| \int_{-\infty}^{\infty} e^{2ikx_0} V(x_0) dx_0 \right|^2 \tag{9}$$

Za konačnu pravokutnu jamu imamo potencijal:

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

Pa je koeficijent refleksije u Bornovoj aproksimaciji:

$$R = \left(\frac{m}{\hbar^2 k}\right)^2 V_0^2 \left| \int_{-a}^{a} e^{2ikx_0} dx_0 \right|^2 = \underline{\underline{\left(\frac{m V_0 \sin(2ak)}{\hbar^2 k^2} \right)^2}}$$

A koeficijent transmisije je $T = 1 - R$.

Egzaktni izraz za koeficijent transmisije je:

$$T = \left[1 + \frac{V_0^2}{4E(E+V_0)} \sin^2\left(\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(E+V_0)} \right) \right]^{-1}$$

Ako pretpostavimo $E \gg V_0$, možemo razviti gornji izraz:

$$T \approx \left[1 + \frac{V_0^2}{4E^2} \sin^2\left(\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2mE} \right) \right]^{-1} \approx$$

$$\approx 1 - \frac{V_0^2}{4E^2} \sin^2\left(\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2mE} \right) =$$

$$= \underline{1 - \left(\frac{m V_0}{\hbar^2 k^2} \sin(2ak) \right)^2}$$

To je upravo izraz koji smo dobili koristeći Bornovu aproksimaciju $\rightarrow$ ona je valjana za $\underline{E \gg V_0}$.

Zadatak 3

Izračunajte amplitudu raspršenja u Bornovoj aproksimaciji za potencijal:

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

Pokažite da za niske energije totalni udarni presjek poprima oblik:

$$\sigma \approx 4\pi \left(\frac{2mV_0 a^3}{3\hbar^2} \right)^2$$

Izraz za amplitudu raspršenja u Bornovoj aproksimaciji:

$$f(\vartheta,\varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r \, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} V(\vec{r}) \quad , \quad \vec{q} = \vec{k}' - \vec{k}$$

$$q = 2k \sin\frac{\vartheta}{2}$$

Nakon integriranja po angularnim varijablama preostaje:

$$f(\vartheta,\varphi) = -\frac{2m}{\hbar^2 q} \int_0^\infty r V(r) \sin(qr) \, dr =$$

$$= -\frac{2mV_0}{\hbar^2 q} \int_0^a r \sin(qr) \, dr = \frac{2mV_0}{\hbar^2 q} \int_0^a dr \frac{\partial}{\partial q} \cos(qr) =$$

$$= \frac{2mV_0}{\hbar^2 q} \frac{\partial}{\partial q} \int_0^a dr \cos(qr) = \frac{2mV_0}{\hbar^2 q} \frac{\partial}{\partial q} \left(\frac{\sin(qa)}{q} \right) =$$

$$= \frac{2mV_0}{\hbar^2 q^3} \left(aq \cos(aq) - \sin(aq) \right)$$

Za niske energije imamo da je $ka = \frac{a}{\hbar}\sqrt{2mE} \ll 1$.
Pošto je $q = 2k \sin\frac{\theta}{2}$ je i $qa \ll 1$ pa aproksimiramo izraz u zagradi vodećim redom u qa:

$$\sin(qa) \approx qa - \frac{q^3a^3}{6}$$

$$\cos(qa) \approx 1 - \frac{q^2a^2}{2}$$

$$\Rightarrow f(\theta,\varphi) \approx \frac{2mV_0}{\hbar^2 q^3}\left(qa - \frac{q^3a^3}{3} - qa + \frac{q^3a^3}{6}\right) =$$

$$= -\frac{2mV_0a^3}{3\hbar^2}$$

Pa je ukupni udarni presjek za male energije:

$$\sigma = \int d\Omega \, |f(\Omega)|^2 \approx 4\pi\left(\frac{2mV_0a^3}{3\hbar^2}\right)^2$$

Zadatak 4

Čestica spina $\frac{1}{2}$, mase m i energije E se raspršuje na meti beskonačne mase spina $\frac{1}{2}$. Ako su i upadna čestica i meta nepolarizirani, a interakcija je oblika:

$$V(r) = \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 \frac{V_0}{a^2+r^2}$$

izračunajte totalni udarni presjek u Bornovoj aproksimaciji. (Uputa: izraziti spinski dio interakcije preko operatora $\vec{S}^2$, $\vec{S}_1^2$ i $\vec{S}_2^2$. Udarne presjeke je potrebno sumirati po konačnim i uprosječiti po početnim stanjima spina.)

$\vec{\sigma} = \sigma_x \hat{x} + \sigma_y \hat{y} + \sigma_z \hat{z}$, σ_i – Paulijeve matrice

$\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$

Raspišimo potencijal u bazi ukupnog spina $\vec{J}$:

$\vec{J} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$

$\vec{J}^2 = \vec{S}_1^2 + \vec{S}_2^2 + 2\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \implies \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 = \frac{2}{\hbar^2}\left(\vec{J}^2 - \vec{S}_1^2 - \vec{S}_2^2\right)$

$$\implies V(r) = \frac{2V_0}{\hbar^2(a^2+r^2)}\left(\vec{J}^2 - \vec{S}_1^2 - \vec{S}_2^2\right)$$

Vidimo da je potencijal dijagonalan u toj bazi.

Upadni snop i meta su nepolarizirani. Stoga se sve četiri moguće spinske konfiguracije javljaju s istim težinskim faktorima. Trebamo izračunati diferencijalni udarni presjek za svaku od tih konfiguracija i onda uprosječiti po njima. U kojoj bazi ćemo raditi je svejedno, no u bazi ukupnog spina račun je najjednostavniji jer je potencijal tu dijagonalan.

Integralni oblik Schrödingerove jednadžbe daleko od ishodišta potencijala je:

$$\psi(\vec{r}) = \psi_0(\vec{r}) - \frac{e^{ikr}}{r}\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d^3r' e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}} V(r)\psi(\vec{r})$$

Postav za raspršenje je $\psi_0(\vec{r}) = N e^{ikz}\chi = N e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\chi$, gdje χ stoji za sve spinske stupnjeve slobode. Bornova aproksimacija sastoji se u uzimanju pod integralom da je $\psi(\vec{r}) \approx \psi_0(\vec{r})$. To vodi na izraz za amplitudu raspršenja:

$$f(\theta,\varphi,\sigma) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d^3r' e^{i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{r}} V(r)\chi$$

Integral po koordinatnoj ovisnosti se za sfernu simetriju svodi na:

$$f(\vartheta, \sigma) = -\frac{2m}{\hbar^2 2}\int_0^\infty dr \, \frac{r V_0 \sin(qr)}{a^2+r^2} \, \chi(\sigma)\, \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 \, \chi$$

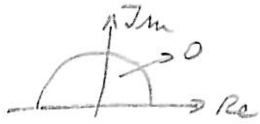
$\chi(\sigma)$ ~ konačno spinsko stanje

Računamo integral:

$$\int_0^\infty dr \, \frac{r\sin(qr)}{a^2+r^2} = \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty} dr \, \frac{r\sin(qr)}{a^2+r^2} = -\frac{i}{2}\int_{-\infty}^{\infty} dr \, \frac{r e^{iqr}}{a^2+r^2} =$$

$$= -\frac{i}{2}\int_{-\infty}^{\infty} dr \, \frac{r e^{iqr}}{(r-ia)(r+ia)}$$

integriramo u kompleksnoj ravnini po



$$= -\frac{i}{2} \, 2\pi i \, \mathrm{Res}(ia) =$$

$$= \pi \, \frac{ia}{2ia} e^{-qa} = \underline{\frac{\pi}{2} e^{-qa}}$$

Za spinski komad imamo sljedeće ...

Za stanje $J=0, \; M=0$:

$$\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 \, |0\,0\rangle = \frac{2}{\hbar^2}\left(\vec{J}^2 - \vec{S}_1^{\,2} - \vec{S}_2^{\,2}\right)|00\rangle =$$

$$= \frac{2}{\hbar^2}\left(\hbar^2 0(1+0) - \hbar^2 \tfrac{1}{2}\left(1+\tfrac{1}{2}\right) - \hbar^2 \tfrac{1}{2}\left(1+\tfrac{1}{2}\right)\right)|00\rangle =$$

$$= -3\,|0\,0\rangle$$

Analogno, za stanje $J=1, \; M=\pm 1, 0$:

$$\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 \, |1\,M\rangle = |1\,M\rangle$$

Pa je diferencijalni udarni presjek za $J=0, M=0$:

$$D_1(\theta) = f_1^*(\theta,\sigma) f_1(\theta,\sigma) =$$

$$= \frac{4m^2}{\hbar^4 q^2} \frac{\pi^2}{4} e^{-2qa} 9 = \underline{\underline{\frac{9\pi^2 m^2}{\hbar^4 q^2} e^{-2qa}}}$$

a za $J=1, M=\pm 1, 0$:

$$\Delta_2(\theta) = f_2^+(\theta,\varphi) f_2(\theta,\varphi) = \underline{\frac{\pi^2 m^2}{\hbar^4 q^2} e^{-2qa}}$$

(Za svaki od slučajeva je konačno spinsko stanje jednako početnom pa ovdje nema nikakve sumacije po konačnim stanjima. Da smo radili u drugoj bazi bismo to morali napraviti.)

Usrednjimo po početnim spinskim konfiguracijama:

$$\Rightarrow \quad D(\theta) = \frac{1}{4}\left(D_1(\theta) + 3D_2(\theta)\right) = \underline{\underline{\frac{3\pi^2 m^2}{\hbar^4 q^2} e^{-2qa}}}$$

$$\underline{\underline{q = 2k \sin\frac{\theta}{2}}}$$

Za totalni udarni presjek imamo:

$$\sigma = 2\pi \int_0^{\pi} d\vartheta \sin\vartheta \, D(\vartheta) =$$

$$= \frac{6\pi^3 m^2}{\hbar^4} \int_0^{\pi} d\vartheta \frac{\sin\vartheta}{4k^2 \sin^2\frac{\vartheta}{2}} e^{-4ak\sin\frac{\vartheta}{2}} =$$

$$= \frac{3\pi^3 m^2}{2\hbar^4 k^2} \int_0^{\pi} d\vartheta \frac{\cos\frac{\vartheta}{2}}{\sin\frac{\vartheta}{2}} \exp\left[-4ak\sin\frac{\vartheta}{2}\right] =$$

$$\left\{ w = \sin\frac{\vartheta}{2}, \; 2dw = \cos\frac{\vartheta}{2} d\vartheta \right\}$$

$$= \frac{3\pi^3 m^2}{\hbar^4 k} \int_0^{1} \frac{dw}{w} e^{-4akw} \longrightarrow \underline{\underline{\infty}}$$

Totalni udarni presjek divergira

(dugodosežan potencijal)