Szórás-elmélet kvantummechanikai alapjai

A terv

→ „intuitív” szórás-elméleti bevezetés + alapvető fogalmak

→ hullámcsomag és fluxussűrűség
→ stacionárius szórási állapotok, aszimptotikus viselkedés
→ szórási hatáskeresztmetszet

→ precízebb mód: integrális szórási egyenleteket és stacionárius szórási állapotok levezetése

→ közelítő megoldás: Born-közelítés

→ az eddigi V(**r**) potenciál után V(*r*) potenciál tárgyalása: parciális hullámok módszerével.

Bevezető fogalmak

Szabad részecske mozgása

→ időfüggő Schrödinger egyenlet írja le

→ $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\mathbf{r},t)$ mivel $V(\mathbf{r}, \mathrm{t}) = 0$
(homogén, lineáris, másodrendű parciális diff. egyenlet)

diff. egyenlet megoldása:

$\psi(\mathbf{r},t) = A\cdot e^{i(\mathbf{kr}-\omega t)}$, ha $\omega = \frac{\hbar \mathbf{k}^2}{2m}$

→ Elektrodinamika ⇒ elektromágneses hullámok E térerősségének hasonló alakja!

→ de Broglie összefüggés: E energiájú p impulzusú részecskékhez ν-t és $\mathbf{k}$-t rendel a fotonok összefüggéseivel analóg módon!

$E = h\nu = \hbar\omega$ és $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$

ν: frekvencia
ω: körfrekvencia
$\mathbf{k}$: hullámszám vektor $\lambda = \frac{2\pi}{|\mathbf{k}|}$

→ a fenti „ha" következménye:

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow E = \frac{p^2}{2m}$$ igaz a szabad részecskére is!

→ szuperpozíció elve (diff. egyenletek tulajdonságából is következik)

⇒ ha van több megoldás, mely kielégíti a fenti d.e-t, akkor ⇒ lineáris kombináció is megoldás

⇒ elvileg ∞ megoldás! ⇒ peremfeltételek kellenek ⇒ [lineáris kombináció is megoldás]

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int g(\mathbf{k}) e^{i(\mathbf{kr} - \omega(k)t)} d^3k$$

d^3k: infinitezimális tereleme a k-térnek

különböző energiájú hfv.-ek keveréke ⇒ nem stacionárius megoldás fv. ⇒ stacionárius fv.-ek lineáris kombinációja

→ Ez nem más mint egy sorfejtés…

→ Fontos megjegyzés: minden négyzetesen integrálható fv. felírható ebben az alakban!

Neve: 3-dimenziós hullámcsomag! $\Rightarrow$ nem pontos energiával készített részecske…

$\rightarrow$ 1-dimenziós (egyszerűsítés)

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} g(k)e^{i(kx-\omega t)}dk$$ $\rightarrow$ síkhullám sorfejtés!

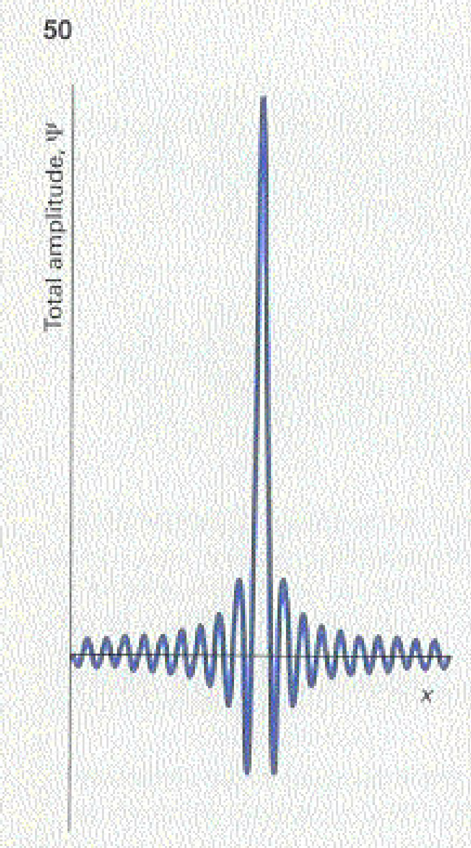

Fig. 2.10. A wavepacket formed by the superposition of many waves with different wavelengths. Twenty waves have been superimposed to produce this figure.

(sorfejtés g(k) együtthatókkal, de $g(k)=\int \psi\psi_R^* dq$, ahol
ψ: együttható, ψ_R^*: bázis fv.)

$\rightarrow$ Nagyon fontos: egy adott időpillanatot, mint t = 0 időpillanatot véve:

- $\psi(x, 0)$ és $g(k)$ Fourier transzformáltjai egymásnak

- $g(k)$: hullámfüggvény k-térbeli reprezentációjának is nevezik!

Fluxus sűrűség definíciója (egy adott irányban)

$$J_x = \frac{\hbar}{2m\mathrm{i}}\left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x}\right)$$

→ stacionárius állapotokra ($V(\mathbf{r}, t) = V(r)$, időtől függő exponenciális faktor kiesik!)

$$J_x = \frac{\hbar}{2mi}\left(\phi^* \frac{\partial \phi}{\partial x} - \phi \frac{\partial \phi^*}{\partial x}\right)$$

→ egy $\phi = A \cdot e^{ikx}$ hullámfüggvényű stacionárius állapotra (jól definiált E)

$$J_x = \frac{\hbar}{2mi} \cdot |A|^2 \cdot \left\{e^{-ikx}(ik)e^{ikx} - e^{ikx}(-ik)e^{-ikx}\right\} = \frac{k\hbar}{m} \cdot |A|^2$$

$\frac{k\hbar}{m}$: sebesség! $\qquad v = \frac{p}{m} = \frac{k\hbar}{m}$

$|A|^2$: valószínűség (annak a valószínűsége, hogy a részecske éppen azt az állapotot tölti be!)

→ Általános definíció: $\frac{1}{\mu}\mathrm{Re}\left[\varphi^*(\mathbf{r})\frac{\hbar}{i}\nabla\varphi(\mathbf{r})\right]$;

∇ → grad v. nabla

Egy példa a fluxus sűrűséggel

→ Mutassuk meg, hogy egy jól definiált energiához rendelt hullámfüggvény J_x-e független a helytől!

Bebizonyítandó $\frac{\partial J_x}{\partial x} = 0$ felhasználva az időtől függő Sch.-egyenletet!

$$\frac{\partial J_x}{\partial x} = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \psi \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2}\right)$$ (a vegyes tagok kiesnek…)

Schrödinger-egyenlet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$ + az egész egyenlet komplex konjugáltjára is igaz!

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} + V\psi^* = -i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi^* \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V\psi\psi^* = i\hbar \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\psi \cdot \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} - V\psi\psi^* = i\hbar \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t}$$

Összeadás:

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

$$\frac{\partial J_x}{\partial x} = -\frac{\partial(\psi\psi^*)}{\partial t} = 0$$ ha az állapot stacionárius!

Ez egyébként: $$\frac{\partial(\psi\psi^*)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0$$

Emlékeztető: egy nem összenyomható folyadék kontinuitási egyenlete (ρ: sűrűség)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0 \qquad \text{ahol } \nabla \mathbf{J} = \frac{\partial j_x}{\partial x} + \frac{\partial j_y}{\partial y} + \frac{\partial j_z}{\partial z} = div\mathbf{J}$$

$$\int_{\text{zárt felület}} \mathbf{jn}dA = -\frac{d}{dt}(tömeg)$$

$$\int_{\text{belső tér}} \nabla \mathbf{j} dV = -\frac{d}{dt}(tömeg) = -\frac{d}{dt}\int_V \rho dV$$

$$\nabla \mathbf{j} = -\frac{d}{dt}\rho = -\frac{\partial \rho}{\partial t}$$

Használva Gauss-tételt!

Valamely tetszőleges vektor normális komponensének bármely zárt felületre vett felületi integrálja egyenlő ugyanezen vektor differenciáljának a felület belsejére vett térfogati integráljával:

$$\int_{\text{zárt felület}} \mathbf{Cn}dA = \int_{\text{belső tér}} \nabla \mathbf{C} dV$$