„Intuitív” szórás-elmélet

Stacionárius szórási állapotok

→ H = H_0 + V(**r**), ahol $H_0 = \frac{P^2}{2\mu}$ → H sajátérték egyenletét oldjuk meg!

→ mivel V(**r**) nem időfüggő, ezért ψ(**r**, *t*) faktorizálható:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \phi(\mathbf{r}) \cdot e^{-iEt/\hbar}$$

ez a megoldás egy jól definiált E értékhez tartozik ⇒ stacionárius állapotok

→ φ(**r**) az időtől független Schrödinger egyenlet megoldása!

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r}) \right] \phi(\mathbf{r}) = E\phi(\mathbf{r})$$

$\Delta = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$: Laplace operátor

→ két részecske ütközése, V(**r**) pot. ⇒ μ tömeg egy V(**r**) „potenciál-térben”

A kezelés feltételei

V(**r**, t) = V($\mathbf{r}_1$-$\mathbf{r}_2$) , de V(**r**) nem Coulomb!

1) nincs spin
2) nincs belső szerkezet ⇒ rugalmas ütközések
3) nincs többszörös szórás
4) nincs szórási koherencia (szórt hfv.-ek között nem lép fel koherencia ⇒ igaz, ha a hullámcsomag kiterjedése sokkal kisebb mint a szóró részecske távolsága!)

$\rightarrow$ definiáljuk: $E = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$ $V(\mathbf{r}) = \dfrac{\hbar^2}{2\mu} U(\mathbf{r})$

$\rightarrow$ Helmholtz differenciálegyenlet (bonyolult diff. egyenlet)

$$\left[\Delta + k^2 - U(\mathbf{r})\right]\phi(\mathbf{r}) = 0$$

$\rightarrow$Azokra az esetekre koncentrálunk, ha E > 0 = belső részecske T-je! $\Rightarrow$ ∞ megoldás van! (egy azon k-hoz is) $\Rightarrow$ (kvantált akkor ha a részecske a tér egy megadott részére lokalizált)

<u>Példa:</u>
Szabad részecskére $(\Delta + k^2)\phi(\mathbf{r}) = 0$ megoldása lehet pl. 1 dimenzióra való egyszerűsítéssel, a $\phi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ fv. tetszés szerint A:B aránnyal. Ugyanez a szituáció itt is!

$\Rightarrow$ fizikai elvek alapján igen nehéz kiválasztani a megfelelő megoldást
$\Rightarrow$ intuitív út $\Rightarrow$ megadjuk a feltételeket, amiket ki kell elégíteni az egyenleteknek

$\Rightarrow$ stacionárius szórási állapotok!

(Megjegyzés: nem hullámcsomagokra, hanem stacionárius állapotokra alapozzuk a levezetést!
Belátható: stacionárius állapotokra ha igaz $\Rightarrow$ az lesz hullámcsomagokra is!)

Stacionárius állapotok aszimptotikus alakja

$\rightarrow$ ha $t \rightarrow -\infty$, akkor $V(\mathbf{r}) = 0 \Rightarrow$ szabad részecske

$\Downarrow$

e^{ikz} alakú tagnak lennie kell

$\rightarrow$ ha $V(\mathbf{r}) \neq 0 \Rightarrow$ hullámcsomag bonyolult módon változik

$\rightarrow$ ha $t \rightarrow \infty$: 2 része van:

- átengedett hullám (az előző e^{ikz} alakú hullám egy része!)
- szórt hullámcsomag

$$v_k(\mathbf{r}) \underset{r \to \infty}{\sim} e^{ikz} + \text{szórt hullámcsomag}$$

- szórt hullám: $\rightarrow \frac{e^{ikr}}{r}$ formájú adott irányban;

$\frac{1}{r}$ biztosítja, hogy a teljes energia (optika) v. teljes valószínűségi amplitúdó, amely egy r sugarú gömbön átfolyik, független legyen r-től!

$\rightarrow$ gömbfelület nagysága $A \sim r^2$

$\rightarrow$ stacionárius állapotra

$$\int \mathbf{J}\mathbf{n}dA = 0 = \int J_{be} \cdot \mathbf{n}dA + \int J_{ki} \cdot \mathbf{n}dA$$

$\int \mathbf{J}_{be} \cdot \mathbf{n}\, dA \quad \rightarrow e^{ikz}$ alakúra állandó!

$\int \mathbf{J}_{ki} \cdot \mathbf{n}dA \rightarrow$ ezért ez is állandó $\rightarrow$

de mivel $A \sim r^2 \rightarrow J_{ki}$-nek $\sim \frac{1}{r^2}$-tel

$\rightarrow$ hfv. $\sim \frac{e^{ikr}}{r}$-rel!!! (ui. e^{ikr} önmagában nem jó!)

$\rightarrow$ szórás nem izotróp (Θ, φ) függő

$$v_k(\underset{r\rightarrow\infty}{\mathbf{r}}) \sim e^{ikz} + f_k(\Theta,\varphi)\frac{e^{ikr}}{r}$$

$f_k(\Theta, \varphi)$: szórási amplitúdó

Megjegyzés #1: e^{ikz} koefficiense nyilvánvalóan z függő lesz a bemenő síkhullám és a kimenő síkhullám eltérő súlya miatt, ami pedig a szórás következménye!

Megjegyzés #2: Vegyük észre, hogy a stac. állapotok képletében (aszimptotikus alak) csak az **r** függő rész található, nincs időfüggés! De ez csak annak a következménye, hogy a teljes ψ-t szeparáltuk egy **r**-től és egy *t*-től függő tagra. Az időfüggés visszajön a képbe, amint a *t*-függő exponenciális taggal beszorozzuk az **r**-függő részt!

Megjegyzés #3: **J** fluxussűrűség EGY adott részecskére vonatkozik!

Stacionárius szórási állapotok fluxusa

Beeső fluxus (áram) $J_Z = \dfrac{k\hbar}{\mu}$ ld. fluxussűrűség bevezetése

Szórt hullámra (szórt fluxus) ∇ (grad) kezelése egyszerűbb polárkoordinátákban ld. aszimptotikus egyenleteket!

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial x}\underline{i} + \frac{\partial}{\partial y}\underline{j} + \frac{\partial}{\partial z}\underline{k} =$$

$$= \nabla_r \hat{r} + \nabla_\Theta \hat{\Theta} + \nabla_\varphi \hat{\varphi}$$

$$(\nabla)_r = \frac{\partial}{\partial r}$$

$$(\nabla)_\Theta = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \Theta}$$

$$(\nabla)_\varphi = \frac{1}{r\sin\Theta}\frac{\partial}{\partial \varphi}$$

J_r (**J** vektor radiális komponense)

$$J_r = \frac{\hbar}{2\mu i} f_k^* f_k \left(\frac{e^{-ikr}}{r}\frac{\partial}{\partial r}\frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{ikr}}{r}\frac{\partial}{\partial r}\frac{e^{-ikr}}{r} \right) = \frac{k\hbar |f_k|^2}{\mu r^2}$$

$$J_\Theta = \frac{\hbar}{\mu i}\cdot\frac{1}{r^3}\cdot\left[f_k \frac{\partial f_k^*}{\partial \Theta} - f_k^* \frac{\partial f_k}{\partial \Theta} \right] = \frac{\hbar}{\mu i}\cdot\frac{1}{r^3}\cdot \mathrm{Re}\left[\frac{1}{i} f_k^* \frac{\partial}{\partial \Theta} f_k \right]$$

$$J_\varphi = \frac{\hbar}{\mu i}\cdot\frac{1}{r^3 \sin\Theta}\cdot\left[f_k \frac{\partial f_k^*}{\partial \varphi} - f_k^* \frac{\partial f_k}{\partial \varphi} \right] = \frac{\hbar}{\mu i}\cdot\frac{1}{r^3 \sin\Theta}\cdot \mathrm{Re}\left[\frac{1}{i} f_k^* \frac{\partial}{\partial \varphi} f_k \right]$$

$J_r \sim \dfrac{1}{r^2} >> J_\Theta, J_\varphi \sim \dfrac{1}{r^3} \Rightarrow$ aszimptotikus megoldásnál csak J_r az érdekes!

Differenciális szórási hatáskeresztmetszet

egységnyi idő alatt dω térszögbe szórt részecskék száma, de egy szóró részecskére: $N_B = 1$

- $d\dot{N} = I_A \cdot \sigma \cdot P(\Theta, \varphi) d\omega$

$I_a = F_i \Rightarrow$ beeső részecskék fluxusa: arányos J_Z-vel $I_A = c \cdot J_Z$

- $d\dot{N} = C \cdot J_r \cdot r^2 \cdot d\omega$

(szórt részecskék száma a detektor $r^2 d\omega$ felületére: kilépő fluxus = $C \cdot J_r \rightarrow$ arányossági tényező ugyanez!!!)

$$\frac{k\hbar |f_k|^2}{\mu r^2} r^2 d\omega = \frac{k\hbar}{\mu} I(\Theta, \varphi) d\omega$$

$$|f_k|^2 = I(\Theta, \varphi)$$