

Integrális szórási egyenlet I.

⇒ Schrödinger-egyenlet és az aszimptotikus határfeltételek egy egyenletbe építése a cél

⇒ módszer: Green-függvény módszer

→ tulajdonképpen megmutatjuk a stacionárius állapotok létét egy precízebb kezeléssel... (hiszen előbb nem mutattuk meg ...)

Green-függvény módszer

→ átalakított Schrödinger-egyenlet:

$$(\Delta + k^2) \cdot \Phi(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r}) \cdot \Phi(\mathbf{r})$$

→ Feltételezzük, hogy létezik egy $G(\mathbf{r})$ függvény, amire

$$(\Delta + k^2) \cdot G(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r})$$

→ $G(\mathbf{r})$ a $(\Delta + k^2)$ operátor Green-függvénye

→ $\delta(\mathbf{r})$ Dirac δ függvény.

Definíció:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x - x_0) f(x) = f(x_0) \quad \vee \quad \int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x) f(x) = f(0)$$

Néhány fv.:

$$\frac{1}{2\varepsilon} e^{-\frac{|x|}{\varepsilon}}$$

$$\frac{1}{\pi} \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2} \rightarrow \text{ha } \varepsilon \rightarrow 0 \text{ a pozitív oldalról}$$



Ha kell tulajdonság, felhasználjuk majd!

Állítás

→ Bármely függvény ami kielégíti

$$\Phi(\mathbf{r}) = \Phi_0(\mathbf{r}) + \int G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')U(\mathbf{r}')\Phi(\mathbf{r}')d^3r'$$

egyenletet, megoldása a fenti diff-egyenletnek (Schrödinger-egyenlet!) is!

→ $\Phi_0(\mathbf{r})$ a homogén egyenlet megoldása, azaz:

$$(\Delta + k^2) \cdot \Phi_0(\mathbf{r}) = 0$$

(az inhomogén és homogén egyenlet lineáris kombinációja lesz a diff. egyenlet ált. megoldás!)

Bizonyítás

→ Alkalmazzuk $\Delta + k^2$ operátort az integrális egyenletre:

$$(\Delta + k^2)\Phi(\mathbf{r}) = (\Delta + k^2) \int d^3r' G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')U(\mathbf{r}')\Phi(\mathbf{r}')$$

(homogén egyenlet megoldása máris kiesik)

→ feltéve ha bevihető (csak \mathbf{r} -re hat az operátor)

$$(\Delta + k^2)\Phi(\mathbf{r}) = \int d^3r' \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')U(\mathbf{r}')\Phi(\mathbf{r}') = U(\mathbf{r})\Phi(\mathbf{r})$$

Q.E.D

(ez fordítva is belátható, azaz bármely megoldása a Schrödinger-egyenletnek kielégíti az integrális egyenletet)

→ Mit csináltunk? Differenciál egyenlet → integrál egyenlet

→ Integrál egyenlet előnye: az aszimptotikus viselkedés beépíthető megfelelően választott Green- függvény segítségével!

⇒ „könnyen” belátható, hogy a

$$G_{\pm}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ikr}}{r}$$

függvény megoldása a Green-függvény definiáló egyenletének!

Kimenő és bemenő Green-függvények

$$\begin{aligned}\Delta G_+ &= \nabla^2 G_+ = \nabla(\nabla G_+) = \nabla \cdot \left\{ \frac{1}{r} \nabla(e^{ikr}) \right\} + \nabla \cdot \left\{ e^{ikr} \cdot \nabla \left(\frac{1}{r} \right) \right\} = \\ &= \frac{1}{r} \nabla^2 e^{ikr} + e^{ikr} \nabla^2 \left(\frac{1}{r} \right) + 2 \nabla \left(\frac{1}{r} \right) \cdot \nabla(e^{ikr})\end{aligned}$$

Standard tulajdonságok:

$$\nabla r = \frac{\mathbf{r}}{r} \quad \text{vektor}$$

$$\nabla \frac{1}{r} = -\frac{\mathbf{r}}{r^3} \quad \text{vektor}$$

$$\nabla \frac{\mathbf{r}}{r} = \frac{2}{r} \quad \text{skalár}$$

$$\nabla \mathbf{r} = 3 \quad \text{skalár}$$

$$\Delta \cdot \frac{1}{r} = -4\pi\delta(\mathbf{r}) \quad \text{skalár}$$

További lépések

$$\nabla e^{ikr} = ike^{ikr} \nabla r = ike^{ikr} \cdot \frac{\mathbf{r}}{r}$$

$$\nabla^2 e^{ikr} = \nabla \left(\frac{i\mathbf{kr} \cdot e^{ikr}}{r} \right) = \frac{i\mathbf{kr} \nabla e^{ikr}}{r} + ike^{ikr} \nabla \frac{\mathbf{r}}{r} = -k^2 e^{ikr} + \frac{2ike^{ikr}}{r}$$

Az eredmény:

$$\Delta G_+ = -\frac{1}{4\pi} \left(-\frac{k^2 e^{ikr}}{r} + \frac{2ike^{ikr}}{r^2} + e^{ikr} (-4\pi\delta(\mathbf{r})) - 2 \frac{\mathbf{r}}{r^3} \cdot \frac{ike^{ikr}}{r} \mathbf{r} \right)$$

$$\Delta G_+ = -k^2 G_+ + e^{ikr} \delta(\mathbf{r}) \quad e^{ikr} \delta(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r}) \quad (\text{csak } r=0\text{-nál nem tűnik el } \delta(\mathbf{r}))$$

Így:

$$(\Delta + k^2)G_+ = \delta(r)$$