تئوری پراکندگی : Scattering Theory (فصل ۱۸ Schwabl)

• برای مطالعه ساختار ماده و شناسائی پتانسیل حاکم بین اجزاء تشکیل دهنده مواد ما از روش پراکندگی استفاده می‌کنیم:

• پراکندگی در ابعاد ذرات بنیادی $10^{-15} - 10^{-18}\,m$

• پراکندگی در ابعاد اتم و مولکولها $10^{-6} - 10^{-10}\,m$

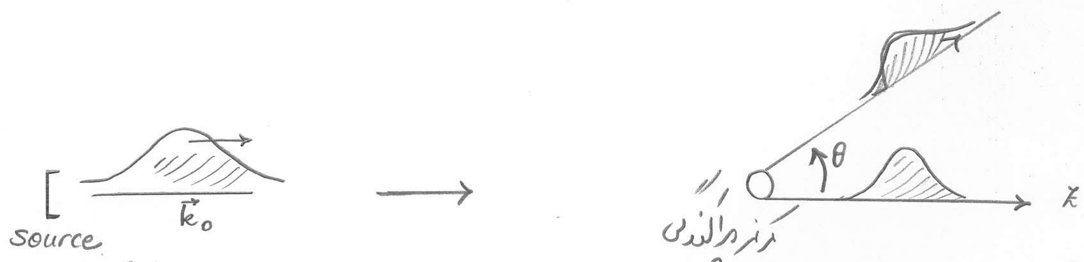
...

برای اینکه بتوان از طریق آزمایش پراکندگی به اطلاعات مربوط به اجزاء تشکیل دهنده ماده پی برد، ۲ شرط وجود دارد:

(الف) ابعاد بسته موج آماده شده فرودی باید در مقابل ابعاد مرکز پراکندگی بزرگ باشد

(ب) ابعاد بسته موج آماده شده باید در مقابل ابعاد موجود در آزمایش باید خیلی کوچک باشد.
(به این دلیل که نمی‌خواهیم هیچگونه همپوشانی بین مرکز پراکندگی و آشکارساز وجود داشته باشد).

در فضای کانفیگ پهنای بسته موج باید به اندازه کافی کوچک باشد، به این ترتیب که پهن شدگی آن در طول آزمایش قابل اغماض باشد.



بعد از برخورد موج نهائی شامل یک تابع موج پراکنده شده و یک تابع موج پراکنده نشده است. در کام می‌محاسبات زیر را فرض می‌کنیم که هر قابلیت ذره در مبدأ دستگاه مختصات به عنوان مرکز پراکندگی در نظر گرفته می‌شود:

Scattering of a wave packet and stationary states:

a) بسته موج:

فرض کنید یک بسته موج از منبع تولید خود در زمان $t = t_0$ خارج می‌شود (بسته فرودی)

Incident wave packet

$$\psi_0(\vec{x}, t_0) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\, a_{\vec{k}}\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$$

✓ این بسته شامل امواج تخت است که دامنه آنها با $a_{\vec{k}}$ تغییر می‌کند.

✓ بیشترین مقدار دامنه در $\vec{k} = \vec{k}_0$ است و به همین معنی سرعت حرکت بسته موج

سرعت گروه $\vec{v}_0 = \dfrac{\hbar \vec{k}_0}{2m}$ است.

با توجه به این سرعت گروه ← $E_{\vec{k}_0} = \frac{\hbar^2 \vec{k}_0^{\,2}}{2m} = \frac{1}{2} m v_0^2$ انرژی جنبشی ذره

← به این ترتیب بسته موج $\psi_0(\vec{x}, t_0)$ یک ذره آزاد را توصیف می‌کند.

• حال این "ذره آزاد" به سمت مرکز پراکندگی در حال حرکت است ←

$\psi(\vec{x}, t)$ تابع موجی است که قرار است بعد از پراکندگی
از روی مرکز پراکندگی ذره را توصیف کند.

• سؤال: شکل این تابع موج بعد از پراکندگی چگونه است؟

← همیلتونی که بسته موج در محیط پراکندگی تحت تأثیر آن قرار دارد و به همین علت تغییر شکل می‌دهد

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + \underbrace{V(\vec{x})}$$

پتانسیلی است که موجب پراکندگی شده است.

راه حل: فرض می‌کنیم معادله ویژه مقداری که برای H می‌توان نوشت به صورت

$$H \psi_{\vec{k}}(\vec{x}) = E_{\vec{k}} \psi_{\vec{k}}(\vec{x})$$

است که در آن $E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \geq 0$ انرژی جنبشی ذرات است.

✓ فرض می‌کنیم ویژه مقادیر انرژی همیلتونی H را داریم.

✓ از $\psi_0(\vec{x}, t_0)$ به عنوان شرط اولیه برای حل معادله ویژه مقداری استفاده می‌کنیم.

✓ فرض می‌کنیم ویژه حالت‌های H شناخته شده‌اند و تشکیل یک پایه کامل و راست‌هنجار را می‌دهند

✓ ابتدا $\psi_0(\vec{x}, t_0)$ را به صورت بسطی از همین پایه‌ها می‌نویسیم (این بسط را بسط برحسب پایه‌های ایستا می‌نامند)
stationary

✓ اگر بتوان این کار را کرد می‌توان تابع موج تغییر شکل یافته را (بعد از اینکه بسته موج یا همان ذره از محیط پراکندگی خارج شد) از روی تحول زمانی $\psi_0(\vec{x}, t_0)$ محاسبه نمود.

• توجه می‌کنیم به معادله ویژه مقداری غیر وابسته به زمان برای همیلتونی که شامل پتانسیل برهمکنش می‌شود:

$$\boxed{H\psi_{\vec{k}}(\vec{x}) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + V(\vec{x})\right)\psi_{\vec{k}}(\vec{x}) = E_{\vec{k}}\psi_{\vec{k}}(\vec{x}) \quad , \quad E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m} \geq 0}$$

سرعت اولیه قبل از پراکندگی $\vec{v}_0$

انرژی جنبشی اولیه قبل از پراکندگی $E_{\vec{k}_0} = \dfrac{\hbar^2\vec{k}_0^2}{2m}$

سرعت بعد از پراکندگی $\vec{v}$

انرژی جنبشی بعد از پراکندگی $E_{\vec{k}} = \dfrac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m}$

← فرض می‌کنیم $\psi_{\vec{k}}$ تشکیل پایه کامل راست‌هنجار را می‌دهد، بطوریکه می‌توان $\psi_0(\vec{x},t_0)$ را برحسب این پایه بسط داد:

$$\boxed{\underbrace{\psi_0(\vec{x},t_0)}_{\text{تابع موج ذره آزاد فرودی}} = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\, \underbrace{A_{\vec{k}}}_{\text{ضریب بسط}}\, \underbrace{\psi_{\vec{k}}(\vec{x})}_{\text{پایه‌های فضای هیلبرت}}}$$

ویژه حالتهای عملگر H برهمکنش

نکته: $\vec{k}$ متغیر پیوسته است و به همین علت روی آن انتگرال گرفته می‌شود. $A_{\vec{k}}$ را بعداً تعیین می‌کنیم.

← اگر $\psi_0(\vec{x},t_0)$ شرط اولیه برای تابع موج باشد، می‌توان تابع موج بعد از پراکندگی $\psi(\vec{x},t)$ را از تحول زمانی $\psi_0(\vec{x},t_0)$ بدست آورد.

$$\psi(\vec{x},t) = \exp\left(-\frac{iH(t-t_0)}{\hbar}\right)\psi_0(\vec{x},t_0)$$

$$= \exp\left(-\frac{iH(t-t_0)}{\hbar}\right)\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}A_{\vec{k}}\psi_{\vec{k}}(\vec{x})$$

$$\boxed{\psi(\vec{x},t) = \int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\, e^{-i\frac{E_k(t-t_0)}{\hbar}}\, A_{\vec{k}}\,\psi_{\vec{k}}(\vec{x})}$$

بسته موج بعد از پراکندگی

این همان بسط برحسب توابع ویژه عملگر همیلتونی H است. از آنجا که $\psi_{\vec{k}}(\vec{x})$ به زمان بستگی ندارد آن بسط را بسط برحسب پایه‌های ایستا می‌نامند.

مکانیک کوانتومی ۳ - صفحه ۷۶ - آبان ۱۳۹۷

هدف: اگر به ترتیب بتوان $\psi_{\vec k}(\vec x)$ و $A_{\vec k}$ را بدست آورد، می توان از روی عبارت بالا $\psi(\vec x,t)$ گفت که بسته موج بعد از زمان t چه شکلی پیدا کرده است.

نکته: فرض اصلی ما (که خیلی هم غیر بدیهی است) این است که همیلتونی H ویژه مقادیری دارد که مساوی هستند با انرژی جنبشی ذره $E_{\vec k}=\frac{\hbar^2\vec k^2}{2m}$، و حالا می خواهیم با توجه به این فرض $\psi_{\vec k}(\vec x)$ را بدست آوریم:

(الف) حل معادله $H\psi_{\vec k}(\vec x)=E_{\vec k}\psi_{\vec k}(\vec x)$ به ازای $E_{\vec k}=\frac{\hbar^2\vec k^2}{2m}$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\vec\nabla_{\vec x}^2+V(\vec x)\right)\psi_{\vec k}(\vec x)=E_{\vec k}\psi_{\vec k}(\vec x) \qquad (1)$$

$$\hookrightarrow \left(\frac{-\hbar^2}{2m}\vec\nabla_{\vec x}^2-E_{\vec k}\right)\psi_{\vec k}(\vec x)=-V(\vec x)\psi_{\vec k}(\vec x)$$

این همان معادله (۱) است ولی قسمت $-V(\vec x)\psi_{\vec k}$ به صورت قسمت غیر همگن معادله دیفرانسیل در نظر گرفته شده است.

✓ استفاده می کنیم از: جواب عمومی معادله ناهمگن = جواب عمومی معادله همگن + جواب خاص معادله ناهمگن

(a) جواب عمومی معادله دیفرانسیل همگن برای $V(\vec x)=0$

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\vec\nabla_{\vec x}^2\psi_{\vec k}(\vec x)=E_{\vec k}\psi_{\vec k}(\vec x) \quad \text{و} \quad E_{\vec k}=\frac{\hbar^2\vec k^2}{2m}\Longrightarrow \psi_{\vec k}(\vec x)=e^{i\vec k\cdot\vec x}$$

جواب عمومی معادله همگن. (موج تخت مربوط به ذره آزاد)

(b) حل معادله دیفرانسیل غیرهمگن (یک جواب خاص با استفاده از تابع گرین Green):

یادآوری: فرض کنید D یک عملگر خطی است و معادله دیفرانسیل غیرهمگن به صورت زیر داده شده است:

$$D_x\psi(x)=f(x)$$

معادله گرین مربوط به عملگر D عبارت است از: $D_x \underbrace{G}_{\text{تابع گرین}}(x-x')=\delta(x-x')$

✓ فرض کنید جواب عمومی معادله $D\psi=f$ عبارت باشد از ψ_0 ← یعنی $D\psi_0(x)=0$

جواب خاص معادله غیرهمگن عبارت است از $\boxed{D_x\psi(x)=f(x)\to\exists\ \psi(x)=\int G(x-x')f(x')dx'}$

در نتیجه جواب نهایی:

$$\boxed{\psi(x)=\psi_0(x)+\int G(x-x')f(x')dx'}$$

$$D_x\psi=D_x\psi_0+\int D_xG(x-x')f(x')dx'\to D_x\psi=0+\int\delta(x-x')f(x')dx'=f(x)\ ✓$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}_x^2 - E_{\vec{k}}\right)\psi_{\vec{k}}(\vec{x}) = -V(\vec{x})\,\psi_{\vec{k}}(\vec{x})$$

در مسئله خودمان $E_k = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\vec{\nabla}_{\vec{x}}^2 + \vec{k}^2\right)\psi_{\vec{k}}(\vec{x}) = -V(\vec{x})\,\psi_{\vec{k}}(\vec{x})$$

$$\left(\vec{\nabla}_x^2 + \vec{k}^2\right)\psi_{\vec{k}}(\vec{x}) = \frac{2mV(\vec{x})}{\hbar^2}\,\psi_{\vec{k}}(\vec{x})$$

Green's equation →

$$\left(\vec{\nabla}_{\vec{x}}^2 + \vec{k}^2\right) G(\vec{x}-\vec{x}') = \delta^3(\vec{x}-\vec{x}')$$

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{x}) = \frac{2m}{\hbar^2}\int G(\vec{x}-\vec{x}')\,V(\vec{x}')\,\psi_{\vec{k}}(\vec{x}')\,d^3x'$$

اثبات:

$$\left(\vec{\nabla}_x^2 + \vec{k}^2\right)\psi_{\vec{k}}(\vec{x}) = \frac{2m}{\hbar^2}\int \underbrace{\left(\vec{\nabla}_{\vec{x}}^2 + \vec{k}^2\right) G(\vec{x}-\vec{x}')}_{=\delta^3(\vec{x}-\vec{x}')}\,V(\vec{x}')\,\psi_{\vec{k}}(\vec{x}')\,d^3x'$$

$$= \frac{2m}{\hbar^2}\,V(\vec{x})\,\psi_{\vec{k}}(\vec{x}) \quad \checkmark \quad \blacksquare$$

نتیجه اینکه: اگر $G(\vec{x}-\vec{x}')$ را بدانیم، در واقع جواب $\psi_{\vec{k}}(\vec{x})$ را خواهیم داشت. پس باید معادله گرین را حل کنیم

$$\left(\vec{\nabla}_{\vec{x}}^2 + \vec{k}^2\right) G(\vec{x}-\vec{x}') = \delta^3(\vec{x}-\vec{x}') \quad \text{or}$$

$$\text{for } \vec{x}-\vec{x}' \equiv \vec{y} \Longrightarrow \boxed{\left(\vec{\nabla}_{\vec{y}}^2 + \vec{k}^2\right) G(\vec{y}) = \delta^3(\vec{y})}$$

برای تعیین $G(\vec{y})$ باید ببریم به فضای فوریه:

$$G(\vec{y}) = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\,\tilde{G}(\vec{q})\,e^{i\vec{q}\cdot\vec{y}} \quad \& \Rightarrow \tilde{G}(\vec{q}) = \int d^3y\, G(\vec{y})\,e^{-i\vec{q}\cdot\vec{y}}$$

طرف چپ:

$$\left(\vec{\nabla}_{\vec{y}}^2 + \vec{k}^2\right) G(\vec{y}) = \left(\vec{\nabla}_y^2 + \vec{k}^2\right)\int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\,\tilde{G}(\vec{q})\,e^{i\vec{q}\cdot\vec{y}}$$

$$= \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\left(-\vec{q}^2 + \vec{k}^2\right)\tilde{G}(\vec{q})\,e^{i\vec{q}\cdot\vec{y}}$$

از طرفی طرف راست

$$\delta^3(\vec{y}) = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\,e^{i\vec{q}\cdot\vec{y}}$$

تساوی →

$$\left(-\vec{q}^2 + \vec{k}^2\right)\tilde{G}(\vec{q}) = 1 \longrightarrow \tilde{G}(\vec{q}) = \frac{-1}{\vec{q}^2 - \vec{k}^2}$$

$$\Rightarrow \boxed{G(\vec{y}) = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\,\frac{e^{i\vec{q}\cdot\vec{y}}}{-\vec{q}^2 + \vec{k}^2}}$$

در اینجا در نیمه راه پاسخ نهایی هستیم. باید انتگرال گیری روی q را انجام دهیم تا به جواب نهایی برسیم:

ادعا: می‌توان نشان داد که بعد از انتگرال گیری روی $\vec{q}$ خواهیم داشت: Retarded Green's function

$$(2)\qquad \boxed{G_+(\vec{y}) = \frac{-e^{ikr}}{4\pi r} \quad \text{with} \quad k=|\vec{k}| \;,\; r=|\vec{y}|}$$

اگر این نتیجه صحیح باشد، جواب نهائی برای $\psi_{\vec{k}}(\vec{x})$ عبارت خواهد بود از:

جواب خاص معادله ناهمگن

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{x}) = \frac{2m}{\hbar^2}\int d^3x' \; G(\vec{x}-\vec{x}')\, V(\vec{x}')\, \psi_{\vec{k}}(\vec{x}')$$

$$= -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d^3x' \; \frac{e^{ik|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|\vec{x}-\vec{x}'|}\, V(\vec{x}')\, \psi_{\vec{k}}(\vec{x}') +$$

کل جواب نهائی

$$\boxed{\psi_{\vec{k}}(\vec{x}) = e^{i\vec{k}\vec{x}} - \frac{m}{2\pi\hbar}\int d^3x' \; \frac{e^{ik|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|\vec{x}-\vec{x}'|}\, V(\vec{x}')\, \psi_{\vec{k}}(\vec{x}')}$$

البته این معادله مجدداً معادله انتگرالی است که صرفاً با تقریب حل می‌شود.

Advanced & Retarded Green's function: اثبات (۲)

مخرج جدید $\quad q^2 - k^2 \mp i\epsilon \qquad k=|\vec{k}|$

$$G_\pm(\vec{y}) = -\lim_{\epsilon\to 0}\int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\,\frac{e^{i\vec{q}\cdot\vec{y}}}{q^2-k^2\mp i\epsilon} \qquad q=|\vec{q}|$$

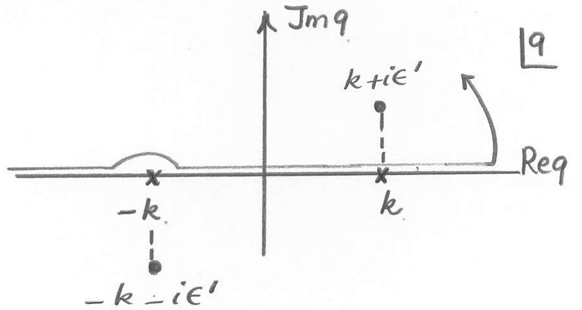
Retarded Green's function:

G_+ : $q^2-k^2-i\epsilon=0 \rightarrow q^2=k^2+i\epsilon$

$$q=\pm\sqrt{k^2+i\epsilon} = \pm k\left(1+\frac{i\epsilon}{k^2}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$= \pm k\left(1+\frac{i\epsilon}{2k^2}\right)$$

$$= \pm k \pm \frac{i\epsilon}{k} = \pm k \pm i\epsilon'$$



Advanced Green's function:

G_- : $q^2-k^2+i\epsilon=0 \rightarrow q^2=k^2-i\epsilon$

$$q=\pm\sqrt{k^2-i\epsilon} = \pm k\left(1-\frac{i\epsilon}{k^2}\right)^{1/2}$$

$$= \pm k\left(1-\frac{i\epsilon}{2k^2}\right)$$

$$= \pm k \mp i\frac{\epsilon}{k} = \pm k \mp i\epsilon'$$