6. SZÓRÁSI ÁLLAPOTOK

Ebben a fejezetben a stacionárius Schrödinger egyenlet *pozitív energiákhoz* tartozó megoldásait, az ún. *szórási állapotokat* vizsgáljuk. (Az energiaskála nulla pontját általában a nemkölcsönható rendszer alapállapoti energiaértékével definiáljuk.) Jóllehet egy szórásfolyamat tipikusan időben lejátszódó jelenség, mégis, amennyiben a szóródó objektumok alkotórészei közti kölcsönhatás független az időtől (azaz a potenciál konzervatív), a szórást jellemző és kísérletileg is megfigyelhető mennyiségek az időtől független Schrödinger egyenletből származtathatók.

Kizárólag olyan ütközésekkel foglalkozunk, amelyekben *két* szóródó partner, vagy egy részecske és egy szórócentrum vesz részt, mivel a három-, ill. többtest ütközések kvantummechanikai elmélete meghaladja célkitűzéseinket. (A háromtest ütközések leírására az 1965-ben felállított Fagyejev-, ill. az ezzel ekvivalens, és 1969-ben felírt Alt-Grassberger-Sandhas egyenletek szolgálnak; négyrészecske szórás a Yakubovski-egyenlet segítségével tárgyalható, míg az általános $n-$test szórási egyenletek elmélete jelenleg is kutatás tárgyát képezi; erre alkalmas egyenletet elsőként Bencze és Redish írt fel 1974-ben.)

Míg az előző fejezetben vizsgált, negatív energiákhoz tartozó megoldások – azaz a kötött állapotok – a tér egy bizonyos tartományára lokalizálódnak [ti. a kötött részecske(rendszer) által elfoglalt térrészre], addig a szórási állapotok nyilvánvalóan nem lokalizálhatók a térben. A szórási állapotok tehát másféle *határfeltételek*nek tesznek eleget, mint a kötött állapotok. A szórási határfeltételek rendkívül változatos formában való megfogalmazásának lehetősége teszi a kvantummechanikai szóráselméletet olyan gazdaggá és szerteágazóvá. Közös gyökere azonban mindegyik megfogalmazásnak az, hogy a szórócentrumtól (a kölcsönhatási tartománytól) távol a hullámfüggvény a

$$(H_0 - E)S(r, E) = 0, \qquad (H_0 - E)C(r, E) = 0$$

ún. ”szabad” Schrödinger egyenletet kielégítő két független megoldás, a reguláris (S) és az irreguláris (C) megoldás lineárkombinációjaként írható fel:

$$\psi(r \to \infty, E) = a(E)S(r, E) + b(E)C(r, E),$$

ahol az $E > 0$ energiától függő a és b együtthatók közvetlen kapcsolatban állnak a mérhető hatáskeresztmetszettel. (A szükséges másik határfeltétel általában az origóbeli regularitás: $\psi =$ véges, ha $r \to 0$.)

6.1. EGYDIMENZIÓS SZABAD MOZGÁS

Egyik célja minden szóráskísérletnek az, hogy általuk a mikrorészecskék kölcsönhatásáról, a köztük lévő V potenciálról információt szerezzünk. A szórásfolyamat a bombázó lövedék (projektil) és a céltárgy (target) részecskéi között zajlik. Az ütközés lehet *rugalmas*, amikor nincs energiacsere, a kijövő részecske (ejektil) kinetikus energiája megegyezik a projektil kinetikus energiájával, lehet *rugalmatlan*, amikor a projektil kinetikus energiája részben az ütköző partner(ek) gerjesztésére fordítódik, s végül, a szórásfolyamat eredményeként megváltozhat az ütköző partnerek anyagi összetétele, amikor is *reakció*ról beszélünk.

Az ütközési folyamat során a lövedék kezdetben makroszkópikus távolságra van a céltárgytól, s az ütközés lezajlása után, a detektáláskor, szintén makroszkópikus távolságra távolodik az ütközés színhelyétől.

Ezért első lépésként azt tisztázzuk, hogy a kvantummechanika szerint hogyan képzelhetjük el egy lövedék mozgását távol a kölcsönhatási tartománytól, ahol $V = 0$.

Az

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\Psi(x,t)$$

Schrödinger egyenlet egy m tömegű szabad részecske mozgását írja le térben és időben.

Ennek az egyenletnek van *síkhullám* megoldása:

$$\Psi_p(x,t) = A(p)e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)},$$

amely egy élesen meghatározott p impulzussal és $E = p^2/2m$ energiával rendelkező részecske pozitív $x-$irányba haladó mozgásának felel meg. Azonban ez a részecske a térben *mindenütt* egyforma valószínűséggel található meg, hiszen $|\Psi_p|^2 = |A(p)|^2$ =állandó (x-ben és t-ben). Ez természetes is, mivel egy síkhullám kiterjedt objektum, nem lokalizálható csupán a tér egy tartományára. Ebből következően a fenti megoldás nem is normálható.

Könnyen belátjuk, hogy

$$(\Delta x)^2 = \langle(x-\langle x\rangle)^2\rangle = \infty, \quad \text{és} \quad (\Delta p)^2 = \langle(p-\langle p\rangle)^2\rangle = 0,$$

összhangban az előbb elmondottakkal.

Egy ilyen idealizált részecske(hullám) sebességét *fázis sebesség*nek hívjuk, amit könnyen kiszámíthatunk a $\lambda = h/p$ hullámhossz és a $T = h/E$ periódusidő hányadosaként:

$$v_f = \frac{\lambda}{T} = \frac{E}{p} = \frac{p}{2m}.$$

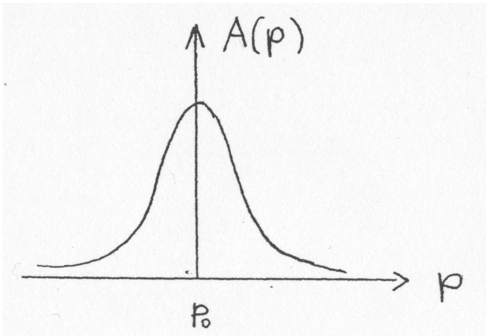
Térben *lokalizált* megoldást kapunk, ha nem egyetlen p impulzus-komponensből állítjuk elő a megoldást, hanem sok különböző impulzusú síkhullám megoldást összegzünk (integrálunk) össze ($E = p^2/2m$):

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} A(p)e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)}dp.$$

Ez a hullámfüggvény nyilván kielégíti a szabad Schrödinger egyenletet. Kimutatjuk, hogy ez a *hullámcsomag*nak nevezett megoldás térben lokalizált szabad részecskét ír le.

Legyen az egyes síkhullám komponensek amplitúdója pl.

$$A(p) = Qe^{-(p-p_0)^2 d^2/\hbar^2}.$$



Ezt behelyettesítve és felhasználva az

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-ax^2+2bx} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{b^2/a}$$

Gauss-integrál értékét, kapjuk:

$$\Psi(x,t) = \frac{Q}{2\pi\hbar}\sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{b^2/a-c},$$

ahol

$$a = \frac{d^2}{\hbar^2} + i\frac{t}{2m\hbar}, \quad b = \frac{d^2}{\hbar^2}p_0 + i\frac{x}{2\hbar}, \quad c = \frac{d^2}{\hbar^2}p_0^2.$$

A Q normalizációs tényezőt $Q = (8\pi d^2)^{1/4}-$nek választva, kapjuk a következő *normált* hullámcsomag megoldást a tartózkodási valószínűségsűrűségre:

$$|\Psi(x,t)|^2 = \frac{1}{d\sqrt{2\pi(1+\Delta^2)}} e^{-(x-vt)^2/2d^2(1+\Delta^2)},$$

ahol bevezettük a hullámcsomag $v = v_{cs}$ *csoport*sebességét és Δ szélességét jellemző mennyiségeket a

$$v = v_{cs} \equiv \frac{\partial E}{\partial p}\Big|_{p=p_0} = \frac{\partial \omega}{\partial k}\Big|_{p=p_0} = \frac{p_0}{m}, \quad \text{és} \quad \Delta = \frac{t\hbar}{2md^2}$$

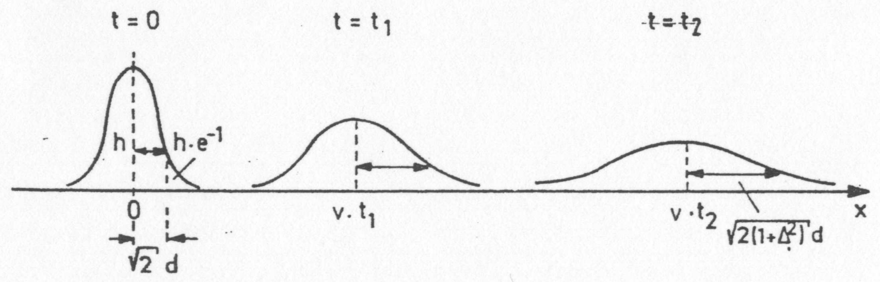
definíciókkal.

Látjuk, hogy az amplitúdókra Gauss eloszlást véve az impulzus-térben, a hullámcsomag maga is Gauss eloszlású lesz az x-térben. Maximuma az $x_0 = vt$ pontban lesz.

Így a hullámcsomag megoldás már felhasználható a szóráskísérletekben alkalmazott lövedék részecskék kvantummechanikai jellemzésére. Mégis, az egyszerűség kedvéért, a szóráselméleti tárgyalásokban általában nem az integrális hullámcsomag megoldás szerepel kiindulásként (kezdeti, kölcsönhatásmentes állapotként), hanem annak csak egyik komponense, a síkhullám megoldás. Mi is ezt az egyszerűsítő utat követjük.

Megjegyzendő még, hogy a hullámcsomag sebessége, a csoportsebesség, kétszerese a p_0 impulzusú síkhullám fázissebességének. Ennek fizikai oka az, hogy a hullámcsomag különböző impulzusú síkhullámok szuperpozíciója s ezek diszperziója, $d\omega/dk = dE/dp$ adja meg az átlagos sebességet. Ebből rögtön következik, hogy a hullámcsomag alakja időben nem állandó, vannak benne "gyorsabb" és "lassabb" komponensek: a hullámcsomag szétfolyik. Ezt a jelenséget, amely a klasszikus fizikában ismeretlen és a hullámmechanikai leírás sajátossága, kvantummechanikai szétfolyás jelenségének hívjuk.

A fenti megoldás jól szemlélteti a szétfolyás jelenségét: a részecske megtalálási valószínűségét jellemző $|\Psi|^2$ haranggörbe függvény maximuma vt sebességgel halad a pozitív $x-$irányba, míg a félérték szélessége időben nő, maximuma pedig csökken (ld. 29. ábra).



29. ábra. A kvantummechanikai szétfolyás jelenségének szemléltetése.

Számítsuk most ki az x operátor várható értékét!

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2\, x\, dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2\, (x - vt)\, dx + \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2\, vt\, dx = vt,$$

mivel a második egyenlőség után álló első tag zérus, lévén $(x - vt)$ páratlan függvénye.

Hasonló módon adódik:

$$(\Delta x)^2 = \langle (x - \langle x\rangle)^2\rangle = d^2(1+\Delta^2), \quad \Delta = \frac{\hbar}{2md^2}t.$$

Példák:

1) Makroszkópikus méretek tartományában a szétfolyás jelensége nem számottevő. Legyen ui. a lövedék hullámcsomagunk tömege $m = 10^{23} \times 10^{-24}g= 10^{-1}$g. Ehhez $\Delta = 10^{-26}t/d^2$ félérték szélesség tartozik. A helybizonytalanság: $\Delta x = d\sqrt{1+\Delta^2}$. Legyen lokalizálva a részecskénk kezdetben, $t = 0$s esetén, $\Delta x = d = 10^{-8}$cm tartományra. $t = 10^{10}$s múlva nő a félérték szélesség $\Delta = 1-$re, s így az elmosódottság $\sqrt{2}-$szeresére: $\Delta x = \sqrt{2} \times 10^{-8}$, ami nem számottevő. Ráadásul ilyen sokáig nem szokott tartani egy kísérlet sem.

2) Mikroszkópikus részecskével, pl. $\alpha-$részecskével elvégzendő kísérlet esetén $\Delta = (10^{-27}/2 \times 4 \times 1,6 \times 10^{-24})t/d^2 \approx 10^{-4}t/d^2$. Az $\alpha-$részecske kiterjedése $t = 0$s esetén: $\Delta x = d = 10^{-11}$cm. Ezért már $t = 10^{-18}$s alatt válik Δ egységgé, s így $\Delta x = \sqrt{2}d$-szeresé. A kvantummechanikai tárgyalás itt már elkerülhetetlen. Hasonló nagyságrendek adódnak, ha egy elektron lokalizáltságát vizsgájuk az atomon belül. Egy elektron-hullámcsomag mérhetetlenül rövid időn belül delokalizálódik az atom teljes tartományára, s így a klasszikus tárgyalás nem lehetséges.

6.2. EGYDIMENZIÓS SZÓRÁS

Ez az eset akkor valósul meg, amikor a szórási (=pozitív energiájú) állapotban levő részecske számára a mozgás csak egy dimenzióban lehetséges (pl. elektron vékony vezetőben). Első példaként azt az esetet vizsgájuk, amikor a részecske mozgása során *egyetlen* potenciálon szóródik, amin részben áthalad, részben visszaverődik. Ilyen eset valósul meg közelítőleg egy $s-$állapotú ($\ell = 0$) α-részecskének az atommagból való kiszabadulásakor (α-bomlás). Más esetben, pl. fémek v. egyéb szilárd anyagok esetén az anyagban levő, nem helyhez kötött (delokalizált) elektronoknak *nagyszámú* hasonló, *periódikus*an elhelyezkedő szórócentrumot kell leküzdeniük mozgásuk során, s ezzel magyarázható többek között a szilárd anyagok különféle tulajdonságai.

Példáinkban a potenciálokra speciális (derékszögű) alakot tételezünk fel, mivel erre az esetre a Schrödinger egyenlet megoldásai analitikus alakban megadhatók.

6.2.1. SZÓRÓDÁS EGYDIMENZIÓS POTENCIÁLGÁTON

Legyen a derékszögű potenciál magassága V_0, szélessége a (30. ábra):

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & -a \le x \le 0 \\ 0 & \text{egyébként.} \end{cases} \qquad (58a)$$

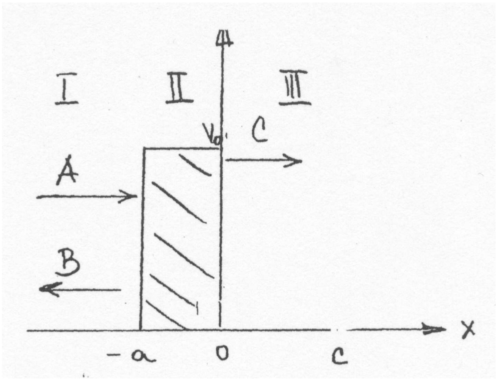


Figure 1: 30. ábra. Potenciálgát.

Klasszikus esetben egy m tömegű, E kinetikus energiájú részecske mindenképpen visszapattan a gátról, ha $E < V_0$, máskülönben áthalad felette.

A kvantummechanika (s így a természet is) megengedi azonban, hogy véges valószínűsége legyen egy $E < V_0$ áthaladásnak, ill. egy $E > V_0$ visszaverődésnek. Ezt a következőképpen láthatjuk be.

A szórást (visszaverődést és áthaladást) a Schrödinger egyenlet írja le:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x). \qquad (58b)$$

A potenciálmentes térrészekben a pozitív energiájú részecske $p = \hbar k = \sqrt{2mE}$ impulzus sajátállapotban van s így az aszimptotikus megoldások a következők:

$$\psi_{\rm I} = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \qquad x \le -a$$

$$\psi_{\rm III} = Ce^{ikx} \qquad x > 0. \qquad (58c)$$

Az 1. fejezet 1.3.b/ pontja alapján tudjuk, hogy a $\psi_{\rm I}$ hullámfüggvény A amplitúdójú része (a 30. ábrán nyíllal jelölt) balról jobbra haladó (beeső) részecske-hullámnak felel meg, a B amplitúdójú része pedig a visszavert részecske-hullámnak. Hasonlóképpen, $\psi_{\rm III}$ a potenciálgáton áthaladt részecske-hullámnak felel meg. Az A, B, C amplitúdók további fizikai jelentésének megállapítása céljából képezzük az áramsűrűséget az I-es és a III-as térrészben. Felhasználva a (15b) képletet:

$$J_x = \frac{i\hbar}{2m}(\Psi\nabla_x\Psi^* - \Psi^*\nabla_x\Psi),$$

az áramsűrűségekre a

$$J_{\rm I}(x) = v(|A|^2 - |B|^2) \equiv J_{be} - J_{vissza}, \qquad x \le -a,$$

$$J_{\mathrm{III}}(x) = v|C|^2 \equiv J_{át}, \qquad x > 0$$

képleteket nyerjük, ahol $v = \hbar k/m$ a részecske sebességét jelenti. Mivel a fenti áramsűrűségek $x-$től függetlenek, ezeket az egyes térrészekben levő nettó részecskefluxusként interpretálhatjuk, ami jól összeegyeztethető avval a fenti megállapítással, hogy A a beeső, B a visszvert, C pedig az áthaladt részecske amplitúdója. Így a visszaverődési (reflexiós) együtthatót az

$$R = \frac{J_{vissza}}{J_{be}} = \frac{|B|^2}{|A|^2},$$

az áthaladási (transzmissziós) tényezőt a

$$T = \frac{J_{át}}{J_{be}} = \frac{|C|^2}{|A|^2}$$

képlet definiálja. Megmaradás miatt $J_{be} = J_{át} + J_{vissza}$, amiből $R + T = 1$ következik.

R és T meghatározása érdekében szükségünk van a potenciálgáton belüli megoldásra, $\psi_{\mathrm{II}}-$re, amely kapcsolatot teremt ψ_{I} és ψ_{III} között. Minthogy a középső tartományban ($-a \leq x \leq 0$) a potenciál konstans, a részecske erőmentes térben mozog, következésképpen szintén impulzussajátállapotban van. A megoldás ezért az előzőekhez hasonlóan (formálisan) szabad síkhullám:

$$\psi_{\mathrm{II}} = Fe^{i\alpha x} + Ge^{-i\alpha x}, \qquad -a \leq x \leq 0,$$

ahol most az $\alpha = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar$ impulzus attól függően valós, vagy imaginárius, hogy $E - V_0$ értéke pozitív, vagy negatív.

Kapcsolatot a különböző térrészbeli megoldások és amplitúdóik között azon regularitási követelmény szolgáltat, miszerint a megoldásoknak és első deriváltjaiknak a potenciál *véges* szakadási helyein meg kell egyezniük (ld. 2.2/b fejezet):

$$\psi_{\mathrm{I}}(-a) = \psi_{\mathrm{II}}(-a), \quad \text{ill.} \quad \psi'_{\mathrm{I}}(-a) = \psi'_{\mathrm{II}}(-a)$$

és

$$\psi_{\mathrm{II}}(0) = \psi_{\mathrm{III}}(0), \quad \text{ill.} \quad \psi'_{\mathrm{II}}(0) = \psi'_{\mathrm{III}}(0),$$

azaz

$$Ae^{-ika} + Be^{ika} = Fe^{-i\alpha a} + Ge^{i\alpha a}, \qquad \text{ill.} \qquad k(Ae^{-ika} - Be^{ika}) = \alpha(Fe^{-i\alpha a} - Ge^{i\alpha a}),$$

és

$$F + G = C, \qquad \text{ill.} \qquad \alpha(F - G) = kC.$$

F és G eliminálása után egyszerű számolással a következő *két* egyenletet nyerjük a számunkra érdekes C/A, ill. B/A amplitúdó arányokra:

$$\frac{C}{A} = e^{-ia(k\mp\alpha)} + \frac{B}{A}\,\frac{\alpha \mp k}{\alpha \pm k}\,e^{ia(k\pm\alpha)}, \tag{59}$$

amelyekből

$$\frac{B}{A} = \frac{(k^2-\alpha^2)(1-e^{i2\alpha a})}{(k+\alpha)^2-(k-\alpha)^2 e^{i2\alpha a}}\, e^{-i2ak},$$

illetve

$$\frac{C}{A} = \frac{4k\alpha e^{i(\alpha-k)a}}{(k+\alpha)^2-(k-\alpha)^2 e^{i2\alpha a}}$$

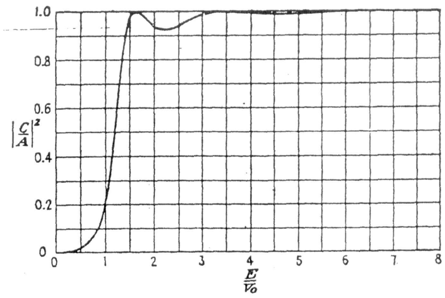
adódik. Így a szórásra jellemző R és T mennyiségek:

$$R = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = \left[1+\frac{4k^2\alpha^2}{(k^2-\alpha^2)^2\sin^2\alpha a}\right]^{-1} = \left[1+\frac{4E(E-V_0)}{V_0^2\sin^2\alpha a}\right]^{-1} \tag{60a}$$

és

$$T = \left|\frac{C}{A}\right|^2 = \left[1+\frac{(k^2-\alpha^2)^2\sin^2\alpha a}{4k^2\alpha^2}\right]^{-1} = \left[1+\frac{V_0^2\sin^2\alpha a}{4E(E-V_0)}\right]^{-1}. \tag{60b}$$

Könnyen meggyőződhetünk arról, hogy $R+T=1$, ami a részecske(áramsűrűség) megmaradást fejezi ki.



31. ábra. Áthaladási együttható a redukált energia függvényében egy "homályos" ($mV_0a^2/\hbar^2 = 8$) potenciálgát esetén.

$E \to V_0$, azaz $\alpha \to 0$ esetén a $\sin\alpha a \sim \alpha a$ sorfejtéssel az áthaladási valószínűség a potenciál átlátszóságára jellemző

$$T(E\to V_0) = \left[1+\frac{mV_0a^2}{2\hbar^2}\right]^{-1}$$

képlettel adható meg, ami egy véges, 0 és 1 közötti értéket szolgáltat. (Látjuk, hogy fizikai várakozásunkkal összhangban egy részecske nem tud áthatolni a falon, ha $m\to\infty$, $V_0\to\infty$, ill. $a\to\infty$.)

Az $E > V_0$ tartományban, növekvő E esetén T oszcillál az egység és egy alulról ehhez közelítő burkoló görbe között (31. ábra). Tökéletes áthaladást (zérus visszaverődést) csak $\alpha a = \pi, 2\pi, ...$ esetén kapunk. Minthogy ez a megállapítás V_0 előjelétől független, *vonzó potenciálvölgy esetén is van visszaverődés.*

A transzmissziós együttható $0 < E < V_0$ tartománybeli viselkedésének megállapítása céljából alkalmazzuk az $\alpha = i\beta$ helyettesítést, ahol $\beta = \sqrt{2m(V_0-E)/\hbar^2}$. Ekkor

$$T = \left|\frac{C}{A}\right|^2 = \left[1+\frac{V_0^2\sinh^2\beta a}{4E(V_0-E)}\right]^{-1} \qquad (E < V_0).$$

Ez a képlet monoton csökkenést jósol az áthaladás valószínűségére $T(E\to V_0)$ fenti értékétől zérusig, amit $E=0$ esetén ér el (ld. 31. ábra, ahol a transzmissziós viszonyokat tüntettük fel egy meglehetősen "homályos" potenciálra, amelynél $mV_0a^2/\hbar^2 = 8$).

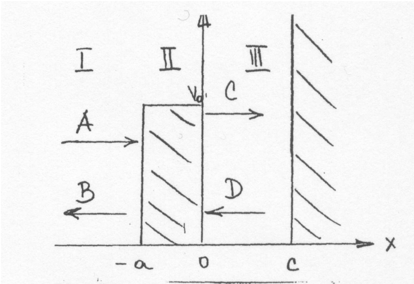
Amennyiben $\beta a >> 1$, azaz a barrier széles és/vagy magas $E-$hez viszonyítva, a fenti képlet (a $\sinh x = [\exp(x)-\exp(-x)]/2$ definíció miatt) a következő egyszerűbb és gyakorta használt formában írható:

$$T \approx \frac{16E(V_0-E)}{V_0^2}e^{-2\beta a} \qquad (E << V_0 \quad \text{és/vagy} \quad \beta a >> 1). \tag{61}$$

Az, hogy $E < V_0$ esetén is van véges valószínűsége a részecske áthaladásának a potenciálgáton, tisztán kvantummechanikai effektus és a részecskék hullámtermészetéből következik. Ennek az *alagúteffektus* néven ismeretes jelenségnek fontos szerep jut a szilárdtestek, molekulák és atommagok tulajdonságainak megértésében (hidegemisszió, spontán ionizáció, molekuláris reakciók, $\alpha-$bomlás, maghasadás, stb.)

6.2.2. POTENCIÁLCSAPDA, VIRTUÁLIS ENERGIASZINTEK

Amennyiben a C amplitúdójú részecskeáram egy (végtelen magasságú) potenciálfallal találja szembe magát az $x = c$ helyen (ld 32. ábra), akkor erről a falról is történik visszaverődés, amely hullám amplitúdóját D-vel fogjuk jelölni. A (58c) egyenlet ezért így módosul:



32. ábra. Potenciálcsapda. Az áthaladó részecskenyaláb amplitúdója (C) sokkal nagyobb is lehet a beesőéhez (A) viszonyítva.

$$\psi_{\mathrm{I}}(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad -a \leq 0$$

$$\psi_{\mathrm{III}}(x) = Ce^{ikx} + De^{-ikx}, \quad c \geq x > 0 \tag{62a}$$

a folytonossági feltételből kapott (59) alatti két egyenlet pedig a következő lesz [kihasználjuk, hogy $\psi_{\mathrm{III}}(c) \equiv 0$]:

$$\frac{B}{A} = \frac{C}{A} e^{-ia(k \pm \alpha)} \left[\frac{\alpha \pm k}{\alpha \mp k} - e^{i2kc} \right] - e^{-i2ak} \frac{\alpha \pm k}{\alpha \mp k}, \tag{62b}$$

s ebből az áthatolásra jellemző amplitúdó a következőnek adódik:

$$\frac{C}{A} = \frac{2k\alpha e^{-iak}}{i \sin a\alpha [(\alpha^2 - k^2)e^{i2kc} - (\alpha^2 + k^2)] + 2k\alpha \cos a\alpha}. \tag{62c}$$

Amennyiben $E < V_0$, érdemes áttérni a korábbi $\alpha = i\beta = i\sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$ jelölésre, és felhasználva az $i \sin ix = -\sinh x = (e^{-x} - e^x)/2$, $\cos ix = \cosh x = (e^{-x} + e^x)/2$ azonosságokat, $a\beta >> 1$ esetén a

$$\frac{C}{A} = \frac{i4k\beta e^{-iak} e^{-a\beta}}{(\beta^2 + k^2)e^{i2kc} + (k^2 - \beta^2) + 2ik\beta}$$

összefüggés adódik. Az áthaladó hullám amplitúdója tehát általában kicsi a beesőéhez viszonyítva. Azonban, ha a beeső hullám energiája történetesen olyan, hogy a fenti kifejezés nevezője kis értéket vesz fel, akkor az áthaladó hullám amplitúdója, ebben a különleges esetben, nagyobb is lehet a beesőénél. Ilyen speciális k hullámszám értékeknél a részecske csapdába kerül: nagyobb valószínűséggel tartózkodik a potenciálgáton belül, mint kívül. Az olyan speciális energiaszinteket, amelyeknél ez a jelenség bekövetkezik, *virtuális energiaszintek*nek nevezzük. A 32. ábrán bemutatott potenciálgátnak megfelelő virtuális energiaszintek a

$$(\beta^2 + k^2)e^{i2kc} + (k^2 - \beta^2) + 2ik\beta = 0 + i0$$

feltételből a következőknek adódnak:

$$(k^2 - \beta^2) + (k^2 + \beta^2) \cos 2kc = 0, \tag{63a}$$

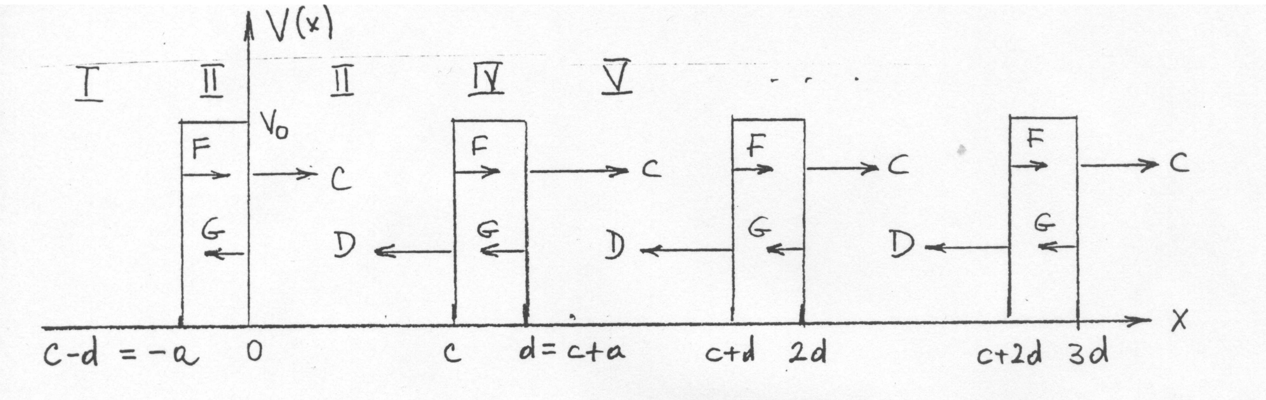
$$2k\beta + (k^2 + \beta^2)\sin 2kc = 0. \tag{63b}$$

Egy megoldását ennek az egyenletrendszernek azonnal megadhatjuk, ha $2kc$–t $(4n-1)\pi/2$–nek választjuk ($n = 1, 2, ...$), mivel ekkor $\cos 2kc = 0$, $\sin 2kc = -1$ és így a további $k = \beta$ feltétellel kielégíthető a fenti egyenlet. Ez utóbbi feltétel az energiára az $E = V_0/2$ megszorítást jelenti. Végeredményben tehát, ha

$$k = \sqrt{mV_0} = \frac{\pi}{c}(n - \frac{1}{4}), \qquad n = 1, 2, ...$$

teljesül, a részecske csapdába kerül. A (63) alatti egyenleteknek több megoldása is lehet fix V_0 és c mellett. Érdekes, hogy a potenciálgát a szélességétől látszólag független az itt megadott virtuális energiaszint értéke. Viszont tudjuk azt, hogy eredményünk csak az $a\beta = ak >> 1$ feltétel teljesülése esetén érvényes.

6.2.3. SZÓRÓDÁS PERIÓDIKUS POTENCIÁLGÁTON. (FÉMEK, FÉLVEZETŐK, SZIGETELŐK MODELLEZÉSE.)



33. ábra. Szóródás periódikus potenciálgáton.

Előző meggondolásainkat kiterjeszthetjük arra az esetre is, amikor nem egyetlen potenciálgát van az $x-$ térben, hanem végtelen sok, egymástól $d = c + a$ periódus távolságra elhelyezkedve (ld. 33. ábra).

Az ilyen *periódikus* potenciált a

$$V(x + d) = V(x) \tag{64}$$

eltolási szimmetria jellemzi, amiből az következik, hogy a Schrödinger egyenlet x helyen vett megoldása, $\varphi(x)$, legfeljebb egy $\gamma =$ *állandó* faktor erejéig különbözhet az az $x + d$ helyen vett megoldástól:

$$\varphi(x + d) = \gamma\varphi(x).$$

Az $n-$edik periódusra

$$\varphi(x + nd) = \gamma^n\varphi(x)$$

adódik, amiből a hullámfüggvényre vonatkozó *korlátossági feltétel* miatt

$$|\gamma| = 1, \quad \gamma = e^{iKd}$$

következik. Végeredményben tehát, periódikus potenciálokhoz a

$$\varphi(x+nd) = e^{iKnd}\varphi(x), \quad n = 0, 1, 2, \dots \tag{65}$$

ún. modulált síkhullám megoldások tartoznak (K valós!).

A lehetséges energiaértékeket – úgyanúgy mint mindig – a határfeltételek (itt: folytonossági kritériumok) kielégítése révén kapjuk meg. A 33. ábra II. és III. térrészében a megoldások a

$$\varphi_{II} = Fe^{\beta x} + Ge^{-\beta x} \tag{66a}$$

$$\varphi_{III} = Ce^{ikx} + De^{-ikx} \tag{66b}$$

formában írhatók. A két zóna határán a megoldásoknak és deriváltjainak meg kell egyezniük:

$$\varphi_{II}(0) = \varphi_{III}(0)$$

$$\varphi'_{II}(0) = \varphi'_{III}(0)$$

azaz

$$F + G = C + D \tag{67a}$$

$$\beta(F - G) = ik(C - D) \tag{67b}$$

A következő periódus, a IV+V zóna megoldásai – (65) miatt – kifejezhetők az előzővel:

$$\varphi_{IV}(x) = e^{iKd}\varphi_{II}(x-d) = e^{iKd}\left[Fe^{\beta(x-d)} + Ge^{-\beta(x-d)}\right] \tag{68a}$$

$$\varphi_{V}(x) = e^{iKd}\varphi_{III}(x-d) = e^{iKd}\left[Ce^{ik(x-d)} + De^{-ik(x-d)}\right] \tag{68b}$$

A két megoldás illesztése a

$$\varphi_{III}(c) = \varphi_{IV}(c)$$

$$\varphi'_{III}(c) = \varphi'_{IV}(c)$$

egyenleteket szolgáltatja, amelyek a ($c - d = -a$)

$$Ce^{ikc} + De^{-ikc} = e^{iKd}\left[Fe^{\beta(-a)} + Ge^{-\beta(-a)}\right] \tag{69a}$$

$$ik\left(Ce^{ikc} - De^{-ikc}\right) = e^{iKd}\beta\left[Fe^{\beta(-a)} - Ge^{-\beta(-a)}\right] \tag{69b}$$

formában írhatók fel. Ez négy (valós) egyenletet szolgáltat a négy (valós) együttható (F, G, C, D) meghatározására. Triviálistól különböző megoldást akkor kapunk, ha az együtthatókból képezett determináns eltűnik, azaz

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ \beta & -\beta & -ik & ik \\ e^{iKd-\beta a} & e^{iKd+\beta a} & -e^{ikc} & -e^{-ikc} \\ \beta e^{iKd-\beta a} & -\beta e^{iKd+\beta a} & -ike^{ikc} & ike^{-ikc} \end{vmatrix} = 0, \tag{70}$$

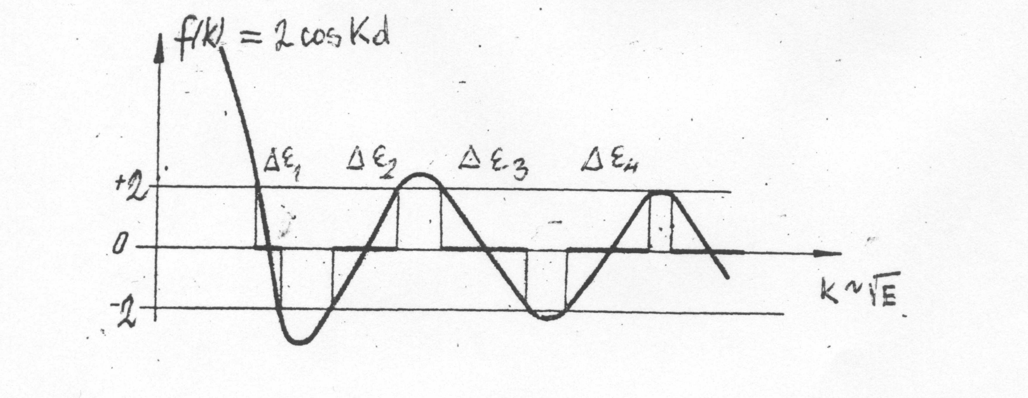
amiből egy kötelező egyenlőség fennállását nyerjük a k hullámszám különböző értékei mellett a K "effektív" hullámszámra:

$$2\cos Kd = e^{-\beta a}\left[\cos kc + \frac{k^2-\beta^2}{2\beta k}\sin kc\right] + e^{\beta a}\left[\cos kc - \frac{k^2-\beta^2}{2\beta k}\sin kc\right] \equiv f(k). \qquad (71)$$

Mármost nyilvánvaló, hogy $f(k)$ csak -2 és $+2$ közötti értékeket vehet fel:

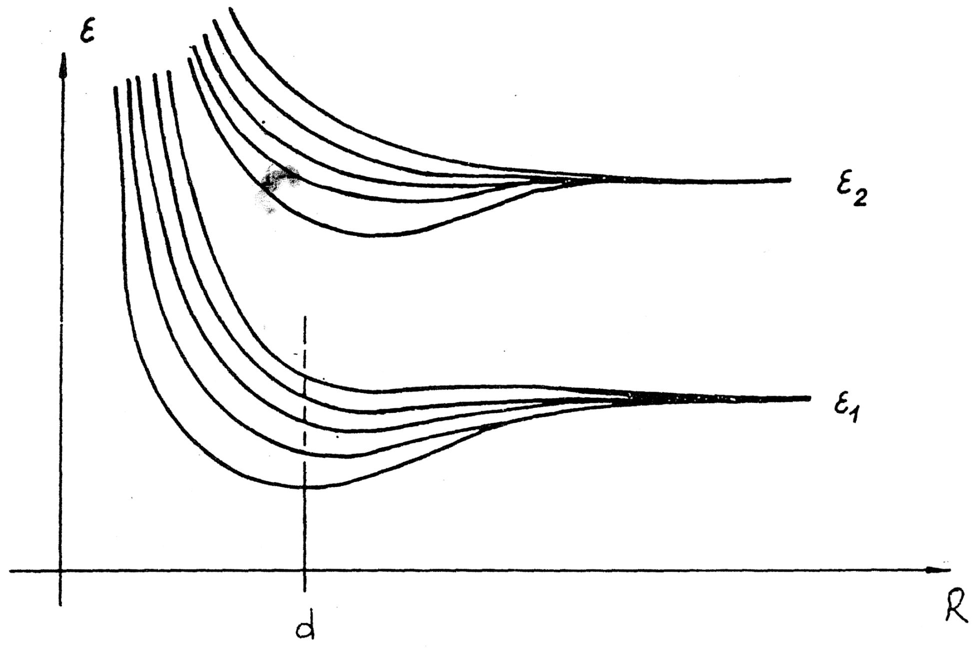
$$-2 \leq f(k) = 2\cos Kd \leq 2,$$

ez a feltétel viszont bármely k érték esetén nem teljesül. Pl., $k = n\pi/c$, $\quad (n = 0, 1, 2, ...)$ esetén biztosan nem elégül ki a fenti egyenlőtlenség. Azt kaptuk tehát, hogy periódikus potenciálok esetén (is) vannak megengedett $E = \hbar^2 k^2/2m_e$ energiaértékek, amelyeknek megfelelő k értékek (71)-et kielégítik, és vannak tiltott értékek, amelyek esetén (71) nem teljesül.



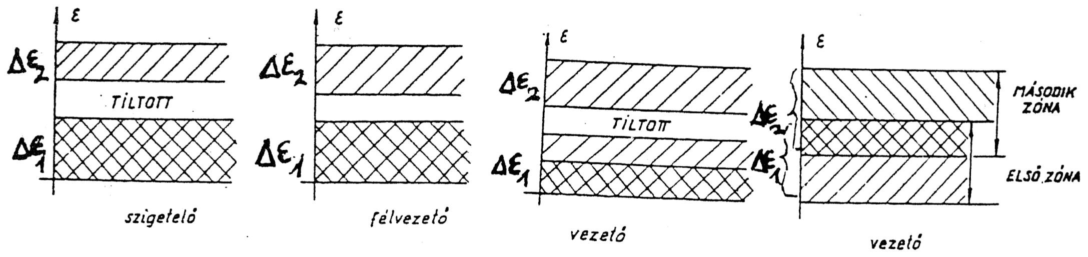
34. ábra. A periódikus potenciálgátban kialakuló megengedett és tiltott energiasávok.

Ez az eredmény rögtön megengedi azt, hogy kvalitatíve értelmezzük a fémek, szigetelők mibenlétét. Képzeljünk el egy igen "híg" fémet, amelyben az egyes atomtörzsek nagyon nagy R távolságra helyezkednek el egymástól. Az atomtörzs potenciáljában kialakulnak az elfajult $\varepsilon_1, \varepsilon_2, ..$ energiaállapotok (vegyértéknívók), amelyeket elfoglalhatnak elektronok (ld. 35. ábra). Közelítve egymáshoz az atomokat, a valenciaszintek felhasadnak a többi atom perturbáló hatására, és egy optimális d rácsállandó esetén, amely mellett az atomtörzsekből és ezeken kívüli elektronokból álló rendszer energiája a legkisebb, kialakulnak a periódikus potenciálokra jellemző tiltott és megengedett $(\Delta\varepsilon_1, \Delta\varepsilon_2)$ energiasávok (ld. 35. ábra).



35. ábra. Szilárdtestek aktív elektronjaihoz tartozó energianívók (-sávok) kialakulása.

Mármost, ha a $\Delta\varepsilon_1$ sáv teljesen be van töltve elektronokkal, a $\Delta\varepsilon_2-$höz tartozó sáv pedig üres, továbbá a két sáv közti távolság ("gap") nagy, akkor az elektronok számára a mozgási lehetőség nyilvánvalóan korlátozott. Az ilyen anyagok rossz elektromos és hővezetők, azaz szigetelők (ld 36. ábra). Amennyiben a két megengedett sáv közti tiltott zóna (gap) kicsi, az alsó betöltött sávból könnyebben gerjeszthetők az elektronok az üresbe, amely által aktív, vezetésre képes elektronokat nyerünk – ezek a félvezetők. Fémek esetén pedig megkülönböztetünk egy-, ill. kétvegyértékű fémeket. Egyvegyétékű fémek esetén az első nívó csak félig van betöltve elektronokkal s ezért már kis elektromos tér hatására kapunk aktív elektronokat. Kétvegyértékű atomokból akkor lesznek jó vezetők (fémek), ha a két sáv átfedi egymást, azaz a két sáv között nincs tiltott zóna és így az elektronok az ε_1-es sávból könnyen átkerülhetnek a "mozgékony" ε_2-es sávba (36. ábra).



36. ábra. Szilárdtestekben kialakuló tiltott zónák szemléltetése.

A szilárdtestfizikában kiterjedten használják az ún. "effektív tömeg" fogalmát. Ennek bevezetése azon alapul, hogy a periódicitás miatt fennálló $\exp(iKnd)\,\varphi(x) = \varphi(x+nd)$ feltétel miatt a K mennyiség a csillapítatlanul transzmittálódó elektron effektív hullámszámával azonosítható (az impulzus az eltolás operátor generátora). Az effektív hullámszám nem feltétlenül egyenlő a k fizikai hullámszámmal. Formálisan azonban felírhatunk egy összefüggést köztük az $m^*(k)$ effektív tömeg bevezetésével a következő módon:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2 K^2(k)}{2m^*(k)}.$$

Minthogy $K(k) = \arccos(f(k)/2)/d$ értékei $-\infty$ és ∞ közé eshetnek, az effektív tömeg értékei is erősen vátozhatnak k függvényében.

6.3. HÁROMDIMENZIÓS SZÓRÁS

Világunk három térdimenzióval rendelkezik, így az ütközési folyamatok valójában mindig három dimenzióban játszódnak le. Az ütközéseket legkényelmesebben tömegközépponti koordináta rendszerben írhatjuk le. Mivel kéttest ütközésekkel foglalkozunk, és az 5.3.1. fejezetben láttuk, hogy a kéttest probléma visszavezethető olyan egytest problémára, ahol egy (redukált) tömeggel rendelkező részecske E (tömegközépponti) energiával mozog a (két részecske kölcsönhatását leíró) $V(\mathbf{r})$ potenciálban, ezért a kétrészecske ütközéseket gyakran *potenciálszórásnak* is nevezzük.

A szóráskísérletek tanulmányozásának nyilvánvaló szükségességét az adja meg, hogy ezen az úton szerezhetünk (közvetett) információt a mikrorészecskék (rendszerek) között működő erőkről. Ez az igény különösen nyilvánvaló abban az esetben, amikor a részecskerendszerek (pl. atommagok, atomok, molekulák, klaszterek) alkotórészei közötti elemi kölcsönhatás nem ismeretes (mint pl. a nukleonok között). De hasonló igény támasztható olyan esetben is, amikor a rendszerek alkotórészei közti erők "egzaktul" ismeretesek, mint pl. az atombeli elektronok között, ugyanis az összetett rendszerek közötti effektív kölcsönhatás elméleti meghatározása a kötött állapoti probléma egzakt megoldását igényli, ami a gyakorlatban kivitelezhetetlen feladat. Így tehát szükségképpen közelítésekre (modell feltevésekre, különböző módszerek bevezetésére) vagyunk utalva, és ahhoz, hogy az egyes közelítések jóságát ellenőrizhessük, kísérleti tapasztalatokhoz kell fordulnunk.

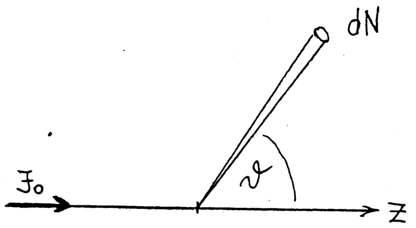
Megjegyzendő, hogy gömbszimmetrikus potenciálok esetére ki van dolgozva a kvantummechanikai szórás *inverz* elmélete. Az R. G. Newton-, ill. Gel'fand-Levitan- és Marchenko-egyenletek segítségével a megfigyelt szórási adatokból meghatározhatjuk a potenciált minden modell-előfeltevés nélkül. A kvantummechanikai szórás inverz elméletével felsőbb éves tanulmányainkban foglalkozunk, jelenlegi célunk a szóráselmélet alapfogalmainak megismerése.

6.3.1. SZÓRÁSI HATÁSKERESZTMETSZET

Egy szóráskísérletben a $V(\mathbf{r})$ kölcsönhatásról szolgáltatott alapvető információ a szóródó részecskék különböző szögtartományba való intenzitás-eloszlásának megfigyeléséből, az ún. *szögeloszlás*ból nyerhető ki.

Egy fixált erőcentrumon, vagy egy másik részecskén (ún. céltárgyon, targeton) szóródó részecskék (lövedékek, projektilek) irány szerinti eloszlását (szögeloszlását) a szórási *hatáskeresztmetszet* fogalmának bevezetésével értelmezhetjük. Tegyük fel, hogy a szórócentrumra J_0 áramsűrűségű bombázó részecskenyaláb esik be és a beesési irányhoz képest ϑ és φ polárszögekkel jellemzett $d\Omega = \sin\vartheta d\vartheta d\phi$ kúpszögben *időegység alatt* dN részecskét detektálunk. A $d\Omega$ térszögben szóródó részecskék dN másodpercenkénti száma arányos J_0-lal, és $d\Omega-$val:

$$dN = \sigma(\vartheta, \phi) J_0 d\Omega, \qquad (72a)$$



ahol az arányossági tényezőt a szórás *differenciális hatáskeresztmetszet*ének nevezzük. Ebbe a mennyiségbe sűrűsödik bele minden információ a tanulmányozni kívánt kölcsönhatásról, $V(\mathbf{r})-$ről.

(72a) teljes térre vett integrálja a részecskék teljes számát adja másodpercenként

$$N = J_0 \int \sigma(\vartheta, \phi) d\Omega \equiv J_0 \sigma_{tot}, \qquad (72b)$$

ahol bevezettük a *teljes hatáskeresztmetszet* fogalmát,

$$\sigma_{tot} = \int \sigma(\vartheta, \phi) d\Omega = \frac{N}{J_0}, \qquad (72c)$$

mint a differenciális hatáskeresztmetszet teljes térre vett integrálját, ami tehát az időegység alatt szóródó részecskék számának és a beeső részecske-nyaláb áramsűrűségének a hányadosa. A differenciális hatáskeresztmetszet szokásos jelölése:

$$\sigma(\vartheta, \phi) = \frac{d\sigma(\vartheta, \phi)}{d\Omega} = \frac{dN}{J_0 d\Omega},$$

szokásos egységei: $a_0^2 = 2.80 \times 10^{-17} cm^2$ (atomfizikában), ill. $1 barn = 10^2 fm^2 = 10^{-24} cm^2$ (magfizikában).

Megjegyzendő, hogy magfizikában fontos szerep jut a hatáskeresztmetszet labor rendszerből tömegközépponti rendszerbe való átszámolásnak. Elektron-atom ütközés esetén a két rendszer gyakorlatilag megegyezik a tömegviszonyok miatt.

6.3.2. SZÓRÁSAMPLITÚDÓ

A (14) stacionárius Schrödinger egyenletet *rövidhatótávolságú* ($\lim_{r\to\infty} V = r^{-1-\varepsilon}$) potenciál esetén kielégíti a következő határfeltétel:

$$\lim_{r\to\infty} \psi^{(+)}_{\mathbf{k}_i} = A\left(e^{i\mathbf{k}_i\mathbf{r}} + f(\vartheta,\phi)\frac{e^{ikr}}{r}\right) \equiv \Phi_{be}(\mathbf{r}) + \psi^{(+)}_{sz}(\mathbf{r},k), \tag{73}$$

ahol $A \neq A(\mathbf{r})$ egy – csak energiától függő – normálási állandó, $f(\vartheta,\phi)$ pedig az ún. *szórásamplitúdó*. Könnyen belátható, hogy a (73) alatti határfeltétel *tetszőleges* $f(\vartheta,\phi)$ szórásamplitúdó mellett kielégíti a Schrödinger egyenletet $O\left(\frac{1}{r}\right)$ rendben [az egyszerűség kedvéért foglalkozzunk csak rugalmas szórásokkal, amelyekre $|\mathbf{k}_i| = k$; továbbá használjuk fel a következő összefüggéseket: $U = V/(\hbar^2/2\mu)$, $\Delta_\mathbf{r} = \nabla^2 = \frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}r - \frac{\mathbf{L}^2/\hbar^2}{r^2}$, $E = (\hbar k)^2/2m$]:

$$\lim_{r\to\infty}\Big[\Delta_\mathbf{r} + k^2 - U(\mathbf{r})\Big]\psi^{(+)}_{\mathbf{k}_i} = \Big[\Delta_\mathbf{r} + k^2 - Cr^{-1-\epsilon}\Big]A\left(e^{i\mathbf{k}_i\mathbf{r}} + f(\vartheta,\phi)\frac{e^{ikr}}{r}\right)$$

$$= A\Big[-k^2e^{i\mathbf{k}_i\mathbf{r}} + k^2e^{i\mathbf{k}_i\mathbf{r}} - Cr^{-1-\epsilon}e^{i\mathbf{k}_i\mathbf{r}} + \Delta_\mathbf{r}f(\vartheta,\phi)\frac{e^{ikr}}{r} + k^2f(\vartheta,\phi)\frac{e^{ikr}}{r} -$$

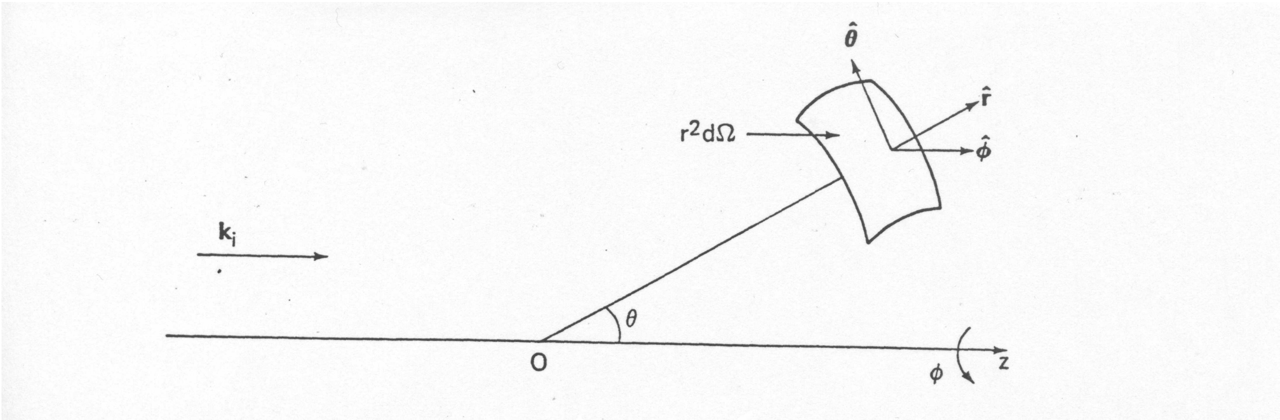
$$-Cr^{-1-\varepsilon}f(\vartheta,\phi)\frac{e^{ikr}}{r}\Big] = A\Big[-Cr^{-1-\epsilon}e^{i\mathbf{k}_i\mathbf{r}} + f(\vartheta,\phi)\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}r\frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{ikr}}{r}\frac{\mathbf{L}^2/\hbar^2}{r^2}f(\vartheta,\phi) +$$

$$+k^2f(\vartheta,\phi)\frac{e^{ikr}}{r} - Cr^{-1-\varepsilon}f(\vartheta,\phi)\frac{e^{ikr}}{r}\Big] = A\Big[-Cr^{-1-\epsilon}\left(e^{i\mathbf{k}_i\mathbf{r}} + f(\vartheta,\phi)\frac{e^{ikr}}{r}\right) -$$

$$-k^2f(\vartheta,\phi)\frac{e^{ikr}}{r} + k^2f(\vartheta,\phi)\frac{e^{ikr}}{r}\Big] + O(\frac{1}{r^3}) = -ACr^{-1-\epsilon}\left(e^{i\mathbf{k}_i\mathbf{r}} + f(\vartheta,\phi)\frac{e^{ikr}}{r}\right) =$$

$$= 0 + O\left(\frac{1}{r}\right).$$

Így tehát (73) a lehető legáltalánosabb határfeltétel, amelyhez a következő szemléltetés fűződik. (73) két hullám szuperpozíciójából áll. Mindkettő kielégíti a Schrödinger egyenletet $r \to \infty-$ben $O(1/r)$ rendben, rövidhatótávolságú potenciál esetén.



37. **ábra.** A beeső és szóródó részecske-hullám, valamint a használt koordináták szemléltetése.

(73) első tagja egy *beeső* végtelen síkhullámot (impulzus sajátállapotot) ír le, ami a bombázó részecske-hullámmal azonosítható. (73) második tagja egy olyan radiális *szórt* hullámot reprezentál, amely a szórás centrumától kifelé mozog, amplitúdója irányfüggő, intenzitása r^2-tel fordítottan arányos (kifutó gömbhullámnak nevezzük; 37. ábra). Ez felel meg a detektálandó részecske-hullámnak.

Az egyenlő fázisú felületek egyenletei:

a) beeső hullám esetén

$$\mathbf{k}_i\mathbf{r} - \omega t = |\mathbf{k}_i| r\cos\vartheta - \omega t = kz - \omega t = \text{const} = a(z,t);$$

az egyenlő fázisú pontok összessége $z-$re merőleges felületeket alkot, amely felületek $\lambda = 2\pi/k$ távolságra vannak egymástól, amennyiben a maximumokat, vagy minimumokat tekintjük egy rögzített t időpillanat esetén. E felületek $v_f = \omega/k$ fázissebességgel haladnak a pozitív z irányba;

b) rugalmasan szórt hullám esetén

$$kr - \omega t = const = b(r,t);$$

ez egy olyan gömbfelület egyenlete, amely $\omega/k = \lambda/T = v_f$ (fázis)sebességgel $\hat{\mathbf{r}}$ irányba terjed $2\pi/k$ hullámhosszal.

Magyarázat: Stacionárius esetben a fázisokhoz mindig hozzáadandó a leszeparált $\exp(-\frac{i}{\hbar}Et)$ tényező fázisa. További elemi összefüggések: $E = \hbar\omega = p^2/2m = \hbar^2k^2/2m \to \omega = \hbar k^2/2m$. Fázissebesség: $dr/dt = d(const/k + \omega t/k)/dt = \omega/k = \hbar k/2m = v/2$, ahol v a csoportsebesség, amit $d\omega/dk$ definiál.

Az A együttható és az f szórásamplitúdó fizikai jelentésének megállapítása céljából kiszámítjuk a *differenciális hatáskeresztmetszet*et mint a detektornál ($r \to \infty-$ben) $\vartheta, \phi = \hat{\mathbf{r}}$ irányban mérhető fluxus és a beeső hullámból származó, szintén mérhető fluxus hányadosát. A detektornál észlelt fluxus a ψ_{sz} szórt hullámból, valamint a bejövő és szórt hullám interferenciájából ered. Megmutatjuk, hogy az interferencia tagból eredő részecske-hullám fluxusa elhanyagolható $r \to \infty-$ben $\vartheta \neq 0$ esetén.

Az egységnyi felületre eső fluxust a valószínűségi áramsűrűség képlete

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{2mi}\Big[\psi^*\nabla_{\mathbf{r}}\psi - \psi\nabla_{\mathbf{r}}\psi^*\Big] = \Re\left(\frac{\hbar}{mi}\psi^*\nabla_{\mathbf{r}}\psi\right) = \mathbf{j}_{be} + \mathbf{j}_{sz} + \mathbf{j}_{int}$$

szolgáltatja (dimenziója: $\frac{rmv}{mr}\frac{1}{r^3}=\frac{1}{s\ cm^2}$). Figyelembe vesszük továbbá, hogy

$$\lim_{r\to\infty}\nabla_{\mathbf{r}}=\lim_{r\to\infty}\left(\frac{\partial}{\partial r}\hat{\mathbf{r}},\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\hat{\vartheta},\frac{1}{r\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\phi}\hat{\phi}\right)=\frac{\partial}{\partial r}\hat{\mathbf{r}}.$$

A beeső részecske-hullám áramsűrűség vektora a $\Phi_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r})=Ae^{i\mathbf{k}_i\mathbf{r}}$ beeső hullámból [(73) első tagja] számolható:

$$\mathbf{j}_{be}=\Re\left(\frac{\hbar}{mi}\Phi_{be}^*\nabla_{\mathbf{r}}\Phi_{be}\right).$$

A bejövő fluxus, amit $\mathbf{k}_i$-ra merőleges egységnyi felületen detektálunk (és amivel osztani fogjuk a detektornál mérhető részecske fluxust) a következő:

$$J_0\equiv j_{be}=\mathbf{j}_{be}\hat{\mathbf{k}}_i=\hat{\mathbf{k}}_i\Re\left(\frac{\hbar}{mi}|A|^2e^{-i\mathbf{k}_i\mathbf{r}}i\mathbf{k}_ie^{i\mathbf{k}_i\mathbf{r}}\right)=|A|^2\frac{\hbar k}{m}=|A|^2v.$$

A kifutó szórt hullám (ψ_{sz}) áramsűrűség vektora

$$\mathbf{j}_{sz}=\Re\left(\frac{\hbar}{mi}\psi_{sz}^*\nabla_{\mathbf{r}}\psi_{sz}\right)$$

Ebből $\hat{\mathbf{r}}$ irányba a detektorhoz

$$j_{sz}=\hat{\mathbf{r}}\mathbf{j}_{sz}=\Re\left(|A|^2\frac{\hbar}{mi}f^*(\Omega)\frac{e^{-ikr}}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(f(\Omega)\frac{e^{ikr}}{r}\right)\right)$$
$$=|A|^2\frac{\hbar k}{m}\frac{1}{r^2}|f(\Omega)|^2+O(\frac{1}{r^3})=|A|^2v\frac{1}{r^2}|f(\Omega)|^2+O(\frac{1}{r^3})$$

egységnyi felületre eső fluxus érkezik.

Vizsgáljuk most az interferencia tagból adódó radiális áramsűrűséget (fluxust).

$$j_{int}=\mathbf{j}_{int}\hat{\mathbf{r}}=\Re\left\{|A|^2\frac{\hbar}{mi}\left[e^{-ikr\cos\vartheta}\frac{\partial}{\partial r}\left(f(\Omega)\frac{e^{ikr}}{r}\right)+f^*(\Omega)\frac{e^{-ikr}}{r}\frac{\partial}{\partial r}e^{ikr\cos\vartheta}\right]\right\}$$
$$=\Re\left\{|A|^2\frac{\hbar}{mi}\left[ik\frac{1}{r}f(\Omega)e^{ikr(1-\cos\vartheta)}+ik\cos\vartheta\frac{1}{r}f^*(\Omega)e^{-ikr(1-\cos\vartheta)}\right]+O\left(\frac{1}{r^2}\right)\right\}\approx 0,$$

mivel (hacsak $\vartheta\neq 0$, előreszórás esete, amelyet később külön megvizsgálunk) igen gyorsan oszcillál, mint r függvénye, amikor $r\to\infty$. Továbbá, vegyük figyelembe, hogy a bejövő hullám $\mathbf{k}_i$ vektorának mindig van szórása ($\Delta\mathbf{k}$). Ebben az esetben az oszcillációs tagok elhanyagolhatók $\vartheta\neq 0-$ra, mivel

$$\lim_{r\to\infty}\int_k^{k+\Delta k}ke^{ikr(1-\cos\vartheta)}dk$$
$$=\lim_{r\to\infty}\frac{1}{ir(1-\cos\vartheta)}\left\{\left[ke^{ikr(1-\cos\vartheta)}\right]_k^{k+\Delta k}-\int_k^{k+\Delta k}e^{ikr(1-\cos\vartheta)}dk\right\}$$
$$=\lim_{r\to\infty}\frac{1}{ir(1-\cos\vartheta)}\left[(k-1)e^{ikr(1-\cos\vartheta)}\right]_k^{k+\Delta k}$$
$$=\lim_{r\to\infty}\frac{1}{ir(1-\cos\vartheta)}\left[(k+\Delta k-1)e^{i(k+\Delta k)(r-z)}-(k-1)e^{ik(r-z)}\right]$$
$$=\lim_{r\to\infty}\frac{1}{i(r-z)}e^{ik(r-z)}\left[(k+\Delta k-1)e^{i\Delta kz}-k+1\right]=0.$$

Végeredményben tehát, ahhoz, hogy megkapjuk a differenciális hatáskeresztmetszetet, (72a) értelmében a szórt részecskék $dN = j_{sz} \times r^2 \times d\Omega$ számát el kell osztani a beeső részecskék $J_0 = j_{be}$ fluxusával és $d\Omega-$val:

$$\sigma(\vartheta, \phi) = \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{dN}{J_0 d\Omega} = \frac{d\Omega r^2 j_{sz}}{j_{be} d\Omega} = \frac{r^2 |A|^2 v \frac{1}{r^2} |f|^2}{|A|^2 v} = |f(\vartheta, \phi)|^2.$$

Azt kaptuk, hogy a szórásamplitúdó abszolút érték négyzete megegyezik a differenciális hatáskeresztmetszettel:

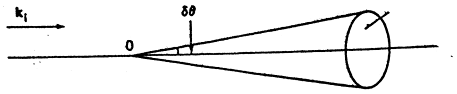
$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\vartheta, \phi)|^2. \tag{74}$$

Ez az a fundamentális összefüggés, amely kapcsolatot teremt a tapasztalat és az elmélet között.

Mint látjuk, a differenciális hatáskeresztmetszet független az A amplitúdótól mivel csak "relatív" valószínűség iránt érdeklődünk mindenkor. Ezért a szórási hullámfüggvényt különbözőképpen lehet "normálni", attól függően, hogy miként választjuk meg az A "normálási" együtthatót. Ha $A = 1$ normálást választunk, akkor a bejövő hullám megtalálási valószínűségi sűrűsége 1 az **r**-térben. Ha $A = 1/\sqrt{v} = 1/\sqrt{\hbar k}$, akor a szórási hullámfüggvényt egységnyi bejövő fluxusra normáltuk. Φ_{be}-re választhatunk hullámcsomag megoldást is, a feladathoz illeszkedő $A(p)$ normálási amplitúdó rögzítésével együtt.

6.3.3. OPTIKAI TÉTEL.

$\vartheta \approx 0$ esetén az interferencia tag nem hanyagolható el. Számítsuk ki e tagból jövő áramsűrűséget, amelyet egy $\delta\theta$ nyílásszögű kúpfelületen r távolságban detektálunk (38. ábra).



38. ábra. A $\delta\theta$ nyílásszögű kúp szemléltetése.

A $\delta\theta$ nyílásszögű $r^2\delta\Omega$ területű kúpfelületen áthaladó részecskék száma $O(\frac{1}{r^2})$ rendben:

$$j_{int}(\delta\theta \approx 0) = r^2 \int_{\delta\Omega} d\Omega \mathbf{j}_{int}\hat{\mathbf{r}} = r^2 \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\delta\theta} d\vartheta \sin\vartheta$$
$$\times \Re\left\{|A|^2 \frac{\hbar}{mi}\left[ik\frac{1}{r}f(\Omega)e^{ikr(1-\cos\vartheta)} + ik\cos\vartheta\frac{1}{r}f^*(\Omega)e^{-ikr(1-\cos\vartheta)}\right]\right\}.$$

Az integrál kiértékeléséhez figyelembe vesszük, hogy $f(\Omega)$ lassan változó függvénye $\vartheta-$nak s ezért a nulla helyen felvett értékével helyettesíthető. Vezessük be az $x = \cos\vartheta$ változót. Ekkor $dx = -\sin\vartheta d\vartheta$. Vegyük figyelembe, hogy

$$\int_0^{\delta\theta} d\vartheta \sin\vartheta e^{ikr(1-\cos\vartheta)} = -\int_1^{\cos\delta\theta} dx e^{ikr(1-x)} = -e^{ikr}\int_1^{\cos\delta\theta} dx e^{-ikrx}$$
$$= -e^{ikr}\frac{1}{-ikr}\left[e^{-ikrx}\right]_1^{\cos\delta\theta} = \frac{e^{ikr}}{ikr}\left[e^{-ikr\cos\delta\theta} - e^{-ikr}\right]$$
$$= \frac{1}{ikr}e^{ikr(1-\cos\delta\theta)} + \frac{i}{kr} = \text{oszc.} + \frac{i}{kr},$$

ahol az oszcilláló rész elhagyható a nem oszcilláló mellet. Így, folytatva az interferencia tagból jövő áramsűrűség kiértékelését ($\cos\vartheta \approx 1$ miatt),

$$j_{int}(0) = \lim_{\delta\theta\to 0} j_{int}(\delta\theta) = 2\pi r^2|A|^2\frac{\hbar k}{mr}\Re\left[f(0)\frac{i}{kr} + f^*(0)\frac{i^*}{kr}\right]$$
$$= 2\pi|A|^2\frac{\hbar}{m}\Re\left[if(0) + i^*f^*(0)\right] = -4\pi\frac{\hbar}{m}|A|^2\Im f(0).$$

Az interferencia tagból adódó részecske-hullám járulék $\vartheta \approx 0$ esetén tehát arányos a szórásamplitúdó imaginárius részével ($\vartheta \neq 0$ esetén az ebből a tagból adódó áramsűrűség zérus, mint korábban láttuk.)

Ha a teljes $r \to \infty$ sugarú gömbfelületere integráljuk a teljes radiális áramot, $j_r = \mathbf{j}\hat{\mathbf{r}}-$t, fluxus megmaradást kapunk a Gauss tétel kihasználásával. Legyen $d\mathbf{f} = \hat{\mathbf{r}}r^2 d\Omega$ a felületelem, ekkor

$$r^2\int d\Omega \mathbf{j}\hat{\mathbf{r}} \equiv \int_{\mathcal{F}} d\mathbf{f}\ \mathbf{j} = \int_{\mathcal{V}} d^3r \nabla\mathbf{j} = 0,$$

ami a

$$\nabla\mathbf{j} + \partial\rho/\partial t = 0$$

kontinuitási egyenlet integrális alakjából az $\int d^3r\rho(\mathbf{r},t) = \int d^3r|\Psi(\mathbf{r},t)|^2 = 1$ norma miatt következik. Mármost, a teljes áramsűrűség három részből tevődik össze: $\mathbf{j} = \mathbf{j}_{be} + \mathbf{j}_{sz} + \mathbf{j}_{int}$ és a bejövő részecske-hullám áramsűrűsége nem ad járulékot a teljes radiális fluxushoz, ugyanis:

$$r^2 \int d\Omega \mathbf{j}_{be}\hat{\mathbf{r}} = r^2 2\pi \int_0^\pi d\vartheta \sin\vartheta |A|^2 v \cos\vartheta = 2\pi r^2 |A|^2 v \int_{-1}^1 dx\, x = 0,$$

ahol a szokásos $x = \cos\vartheta$, $dx = -d\vartheta \sin\theta$ helyettesítést alkalmaztuk.

Ezért a teljes fluxushoz csak $\mathbf{j}_{sz}$ és $\mathbf{j}_{int}$ ad járulékot, az utóbbi csak $\theta \approx 0$ esetén, mint láttuk, az előbbi pedig a (differenciális) hatáskeresztmetszettel kapcsolatos. Írható tehát

$$0 = r^2 \int d\Omega(\mathbf{j}_{sz} + \mathbf{j}_{int})\hat{\mathbf{r}} = r^2 \int d\Omega |A|^2 v \frac{1}{r^2}|f(\Omega)|^2 - 4\pi|A|^2 \frac{\hbar}{m}\Im f(0)$$

$$= |A|^2 \left(v\sigma_{tot} - 4\pi \frac{\hbar}{m} \Im f(0) \right) = 0,$$

amiből nyerjük a nevezetes *optikai tétel*t:

$$\sigma_{tot} = \frac{4\pi}{k}\Im f(0). \tag{75}$$

Az optikai tétel rendkívül fontos mind elméleti, mind gyakorlati szempontból. Kapcsolatot teremt kísérlet és elmélet között. Lehetővé teszi a nem teljes (ϑ, ϕ) szögtartományban végrehajtott mérésekből történő teljes hatáskeresztmetszet meghatározását. Ezenkívül az elméleti modellek, illetve közelítések számára is támpontot jelent a (75) alatti egzakt összefüggés.

6.4. SZÓRÓDÁS GÖMBSZIMMETRIKUS POTENCIÁLON. PARCIÁLIS HULLÁMOK MÓDSZERE.

Tekintsük a

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}r + \frac{\mathbf{L}^2}{2\mu r^2} + V(r) - E\right]\psi^{(+)}_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}) = 0$$

Schrödinger egyenletet, ahol a potenciál csak $|\mathbf{r}| = r$ abszolút értékétől függ $[|\mathbf{k}_i| = k, E = (\hbar k)^2/2\mu > 0, \quad \mu$ a redukált tömeg].

Mármost, tetszőleges $\psi^{(+)}_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r})$ reguláris függvény sorbafejthető az impulzusmomentum sajátfüggvényei, a gömbfüggvények szerint

$$\psi^{(+)}_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} c_{lm}(\mathbf{k}_i)u_{lm}(\mathbf{k}_i, r)Y_l^m(\hat{\mathbf{r}}) = \sum_{l=0}^{\infty} c'_l(k)u_l(k,r)P_l(\cos\vartheta), \tag{76a}$$

ahol a második egyenlőség jel utáni átalakításban kihasználtuk, hogy a potenciál csak r-től függ, és ezért — a $z-$tengelyt a beesés $\hat{\mathbf{k}}_i$ irányával párhuzamosnak választva, valamint a

$$\sum_m Y_l^m(\hat{\mathbf{r}})Y_l^{m*}(\hat{\mathbf{k}}_i) = \frac{2l+1}{4\pi}P_l(\cos\vartheta)$$

összegzési tételre figyelemmel, — a mágneses kvantumszámra vonatkozó összegzés elvégezhető, és a hullámfüggvény csak $r-$től és $\vartheta-$tól függő formára egyszerűsödik. A szórási hullámfüggvény (73) aszimptotikus alakjában fellépő f szórásamplitúdó ezért szintén csak ϑ függvénye lesz. Így az aszimptotikus alak gömbszimmetrikus potenciál esetén

$$\lim_{r\to\infty}\psi^{(+)}_{\mathbf{k}_i} = A\left(e^{i\mathbf{k}_i\mathbf{r}} + f(\vartheta)\frac{e^{ikr}}{r}\right). \tag{76b}$$

Behelyettesítve a (76a) alatti kifejtést a Schrödinger egyenletbe, kapjuk a "parciális" (azaz: rész) hullámokra felírt Schrödinger egyenletet:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}r + \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E\right]u_l(r) = 0, \tag{76c}$$

amelyből az

$$u_l(r) = \frac{1}{kr}R_l(r)$$

helyettesítés útján nyerjük az ún. *radiális* szórási Schrödinger egyenletet

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E\right]R_l(r) = 0, \tag{76d}$$

az $R_l(r)$ *radiális* hullámfüggvényre. (Figyeljük meg, hogy R_l most nem függ a kötött állapotokra jellemző n kvantumszámtól, hiszen folytonos spektrum esetében vagyunk; n a hullámfüggvény nódusaival, csomópontjaival is kapcsolatos volt – egy szórási hullámfüggvény végtelen sok nódussal rendelkezik, hiszen térben nem lokalizált.)

(76d) megoldásához ismernünk kell $u_l(r)-$t két pontban. Ez $r = 0$ és $r = \infty$ lesz.

A hidrogénatom tárgyalásánál láttuk, hogy amennyiben a $V(r)$ potenciál nem szingulárisabb $1/r-$nél, akkor az ún. indiciális (az origóbeli megoldások hatványkitevőire vonatkozó) egyenletek vizsgálatából

$$u_l(r \to 0) \propto \begin{cases} r^l & reg \\ r^{-l-1} & irreg \end{cases}$$

következett, ami az $R_l(r) = kr\, u_l(r)$ radiális függvényre a

$$R_l(r \to 0) \propto \begin{cases} r^{l+1} & reg \\ r^{-l} & irreg \end{cases}$$

határfeltételt szolgáltatja. A hullámfüggvényre vonatkozó regularitási követelmény miatt tehát az origóbeli határfeltétel

$$u_l(0) = \begin{cases} \text{konst.,} & ha \quad \text{l=0,} \\ 0 & egyébként, \end{cases} \qquad \text{illetve} \quad R_l(0) = 0, \quad l = 0, 1, ... \tag{77}$$

Az $r \to \infty-$beli határfeltétel megállapítása céljából válasszuk először (76d)–ben $r-$et olyan nagynak, hogy mind $V(r)$, mind a centrifugális tag, $l(l+1)/r^2$, elhanyagolható legyen. Ekkor

$$R_l(r \to \infty; k) \propto e^{\pm ikr} \tag{78a}$$

nyilvánvalóan kielégíti az egyenletet ($E = \hbar^2 k^2/2m$). Jobb közelítést kapunk, ha ezt az extrém aszimptotikus alakot kiegészítjük egy $f(r)$ függvénnyel a következő módon:

$$R_l(r \to \infty; k) = \lim_{r \to \infty} A e^{\pm ikr + \int_a^r f(r')dr'}, \tag{78b}$$

ahol A és a konstansok. Behelyettesítve (76d)–be, a következő differenciál egyenletet nyerjük $f-$re:

$$f' + f^2 \pm 2ikf = \frac{2m}{\hbar^2} V(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} \equiv W(r). \tag{78c}$$

Mármost, ha $W(r) \propto r^{-s}$, akkor a baloldal utolsó tagja, lévén nagyságrendben a vezető tag, szintén $r^{-s}-$ként tart zérushoz. Így az exponensben álló integrál

$$\lim_{r \to \infty} \int_a^r (r')^{-s} dr' = \frac{1}{1-s} \Big[\lim_{r \to \infty} r^{1-s} - a^{1-s} \Big] \tag{78d}$$

konvergens, ha $s > 1$, és akkor (78b) szintén (78a) alakjában írható. Amennyiben $W(r)$ exponenciálisan tűnik el és $l = 0$, a (78c) bal oldalán álló $f'-$s tagot is figyelembe kell venni f mellett. Nehézség nélkül megmutatható, hogy ekkor is (78a) az általános alak. Az egyetlen kivételre, $s = 1$ esetére, a Coulomb szórás tárgyalásánál még visszatérünk.

A (78a) végtelenbeli határfeltételek fizikai jelentése nyilvánvaló: e^{ikr} az $\hat{\mathbf{r}}$ irányba *szórt* (*kifutó*), az e^{-ikr} az $\hat{\mathbf{r}}$ irányból *beeső* (*befutó*) hullámot jelenti. Ez a két hullám keveredik mindegyik $R_l(r;k)$ parciális hullámban nagy $r-$ek esetén, ami ezért a következő legáltalánosabb formába írható:

$$R_l(r \to \infty; k) = \tilde{A}_l \sin(kr + \tilde{\delta}_l), \tag{79}$$

ahol a két integrációs állandó, $\tilde{A}_l$ és $\tilde{\delta}_l$ elvben még komplex is lehet. A befutó és kifutó hullám keveredési amplitúdóját ez a két állandó határozza meg.

A (76d) radiális parciális szórási Schrödinger egyenlet $R_l(r;k)$ megoldásait tehát a (77) és (79) határfeltételek egyértelműen meghatározzák (egy komplex szorzási állandótól eltekintve). A megoldás azonban valós, mivel $r=0-$ban valósként indul, és k, V, és l valós. Így $\tilde{\delta}_l-$nek is valósnak kell lenni, $\tilde{A}_l$ viszont lehet komplex. $\tilde{\delta}_l$ valós esetén megmutatható, hogy a (76a) részecske-hullámból eredő totális radiális fluxus egy teljes (végtelenbeli) gömbfelületen zérus:

$$\lim_{r\to\infty} r^2 \int d\Omega \mathbf{j}\hat{\mathbf{r}} = \lim_{r\to\infty} r^2 \int d\Omega \Re\left(\frac{\hbar}{mi}\psi^{(+)*}_{\mathbf{k}_i}\frac{\partial}{\partial r}\psi^{(+)}_{\mathbf{k}_i}\right)$$

$$= \lim_{r\to\infty} r^2 2\pi \Re \sum_{ll'}\left(\frac{\sin(kr+\tilde{\delta}_l)}{r}\frac{\partial}{\partial r}\frac{\sin(kr+\tilde{\delta}_{l'})}{r}\right)\int d\vartheta \sin\vartheta P_l(\cos\vartheta)P_{l'}(\cos\vartheta)\frac{\hbar}{mi}\tilde{A}^*_l\tilde{A}_{l'}$$

$$= 2\pi\sum_{l=0}^{\infty}|\tilde{A}_l|^2 \lim_{r\to\infty} r^2\Re\left(\frac{\sin(kr+\tilde{\delta}_l)}{r}\frac{\partial}{\partial r}\frac{\sin(kr+\tilde{\delta}_l)}{r}\right)\frac{\hbar}{mi}$$

$$= \pi\Re\frac{\hbar k}{mi}\sum_{l=0}^{\infty}|\tilde{A}_l|^2\sin 2(kr+\tilde{\delta}_l) = 0, \qquad \text{ha} \qquad \tilde{\delta}^*_l = \tilde{\delta}_l$$

ahol $\tilde{A}_l$ tartalmazza a (76a)-ban előforduló $c'_l(k)$ együtthatót is.

Amennyiben $\tilde{\delta}_l$ valós, a fenti eredmény tehát azt jelenti, hogy a szórási tértartományon belül a részecskéknek nincs forrása, illetve "elnyelője". A kifelé szóródott részecskék ezért egyedül a beeső részecske-hullámból származhatnak. Komplex potenciál esetén $\tilde{\delta}_l$ komplex és ezért a teljes fluxus az r gömbfelületen nem tűnik el; ezzel reakciók lefolyását és rugalmatlan ütközések bekövetkeztét lehet modellezni (ld. Feshbach-, ill. Watson-féle optikai potenciál formalizmus).

Általában nem a végtelenbeli (79) határfeltétellel dolgozunk, hanem kihasználjuk azt, hogy a gyakorlatban a potenciál egy *véges* r_0 távolságon túl zérusnak vehető. Az r_0 távolság viszont még nem olyan nagy, hogy a centrifugális tag elhanyagolható lenne. A (76d) Schrödinger egyenlet ebben az esetben a Bessel-féle differenciál egyenletbe megy át ($V=0$, $E=\hbar^2k^2/2m$) :

$$\left[\frac{d^2}{dr^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}+k^2\right]R^{sz}_l(r)=0, \qquad r>r_0, \tag{80}$$

amelyet "szabad" radiális Schrödinger egyenletnek is szoktunk hívni. Két független megoldása a $j_l(kr)$ *szférikus Bessel-* és az $n_l(kr)$ *szférikus Neumann-függvény*nyel kapcsolatos:

$$R^{reg}_l(kr) = krj_l(kr) = \left(\frac{\pi kr}{2}\right)^{1/2} J_{l+\frac{1}{2}}(kr) \rightarrow \sin(kr-\frac{1}{2}l\pi), \quad \text{ha} \quad r\to\infty,$$

$$R^{irreg}_l(kr) = -krn_l(kr) = (-1)^l\left(\frac{\pi kr}{2}\right)^{1/2} J_{-l-\frac{1}{2}}(kr) \rightarrow \cos(kr-\frac{1}{2}l\pi), \quad \text{ha} \quad r\to\infty.$$

Az $R_l(r;k)$ radiális szórási hullámfüggvény kifejezhető R^{reg}_l és R^{irreg}_l lineárkombinációjaként r_0-nál nagyobb távolságokra:

$$R^{(a)}_l = R_l(r;k) = \tilde{A}_l[R^{reg}_l(kr)\cos\delta_l + R^{irreg}_l(kr)\sin\delta_l] =$$

$$= \tilde{A}_l kr\big[j_l(kr)\cos\delta_l - n_l(kr)\sin\delta_l\big], \quad r>r_0, \tag{81a}$$

amelynek aszimptotikus alakja – figyelembe véve j_l és n_l feltüntetett aszimptotikus tulajdonságait – (79)-al ekvivalens formába írható:

$$R_l^{(a)} = R_l(r \to \infty; k) = \tilde{A}_l[\sin(kr - \frac{1}{2}l\pi)\cos\delta_l + \cos(kr - \frac{1}{2}l\pi)\sin\delta_l] = \tilde{A}_l \sin(kr - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l), \quad (81b)$$

és így

$$u_l(r \to \infty; k) = \tilde{A}_l(kr)^{-1}\sin(kr - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l). \quad (81c)$$

Ismervén az u_l és R_l parciális hullámok aszimptotikus alakját, meghatározhatjuk a differenciális hatáskeresztmetszetnek az egyes parciális hullámokból adódó összetevőit. Ehhez nem kell mást tenni, mint (76a) és (76b) aszimptotikus alakjait összehasonlítani. Ennek érdekében a (76b)-ben fellépő $e^{i\mathbf{k}_i\mathbf{r}}$ függvényre (síkhullámra) alkalmazzuk az ismert kifejtési tételt, egyúttal vesszük a limeszt is:

$$\lim_{r\to\infty} e^{i\mathbf{k}_i\mathbf{r}} = \lim_{r\to\infty} e^{ikz} = \lim_{r\to\infty} e^{ikr\cos\vartheta} = \lim_{r\to\infty}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l j_l(kr)P_l(\cos\theta)$$

$$= \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l(kr)^{-1}\sin(kr - \frac{1}{2}l\pi)P_l(\cos\vartheta).$$

Ezt behelyettesítjük (76b)-be és az így kapott kifejezést egyenlővé tesszük (76a) aszimptotikus alakjával, amit (81c) felhasználásával kapunk. Tehát:

$$\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l(kr)^{-1}\sin(kr - \frac{1}{2}l\pi)P_l(\cos\vartheta) + f(\vartheta)r^{-1}e^{ikr}$$

$$= \sum_{l=0}^{\infty}A_l(k)(kr)^{-1}\sin(kr - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l)P_l(\cos\vartheta),$$

ahol most A_l tartalmazza a (76a)-ban fellépő c_l' együtthatókat is, osztva a (76b)-beli általános ($l-$től független) A állandóval. Az egyenlet bal- és jobboldalán álló e^{ikr} és e^{-ikr} függvények együtthatói egyenlők kell legyenek, azaz $[\sin x = (\exp(ix) - \exp(-ix))/2i]$

$$2ikf(\vartheta) + \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l e^{-\frac{1}{2}il\pi}P_l(\cos\vartheta) = \sum_{l=0}^{\infty}A_l e^{i(\delta_l - \frac{1}{2}l\pi)}P_l(\cos\vartheta)$$

és

$$\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l e^{\frac{1}{2}il\pi}P_l(\cos\vartheta) = \sum_{l=0}^{\infty}A_l e^{-i(\delta_l - \frac{1}{2}l\pi)}P_l(\cos\vartheta)$$

Minthogy ez igaz ϑ minden értékére és a Legendre polinomok ortogonálisak egymásra, az utóbbi egyenletből meghatározhatjuk az $l-$edik parciális hullám (aszimptotikus) normálási együtthatóját:

$$A_l = (2l+1)i^l e^{i\delta_l}.$$

Ezt behelyettesítve az előbbibe, kapjuk a kívánt összefüggést a szórásamplitúdó parciális hullámok szerint kifejtett alakjára:

$$f(\vartheta) = \frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(e^{2i\delta_l} - 1)P_l(\cos\vartheta)$$

$$= \frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)e^{i\delta_l}\sin\delta_l P_l(\cos\vartheta), \quad (82)$$

ugyanis

$$\frac{1}{2i}(e^{2i\delta_l}-1)=\sin\delta_l e^{i\delta_l}.$$

Minthogy $P_l(1)=1$ bármely $l-$re, az előreszórás szórási amplitúdója:

$$f(0)=\frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(e^{2i\delta_l}-1)$$

$$=\frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)e^{i\delta_l}\sin\delta_l,$$

és ennek imaginárius része (ami az optikai tételben játszott szerepet):

$$\Im f(0)=\frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l.$$

A differenciális hatáskeresztmetszet a szórásamplitúdó abszolutérték négyzete:

$$\sigma(\vartheta)=|f(\vartheta)|^2=\frac{1}{k^2}\Big|\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)e^{i\delta_l}\sin\delta_l P_l(\cos\vartheta)\Big|^2$$

$$=\frac{1}{k^2}\sum_{l\geq l'=0}^{\infty}(2l+1)(2l'+1)\sin\delta_l\sin\delta_{l'}P_l(\cos\vartheta)P_{l'}(\cos\vartheta)\cos(\delta_l-\delta_{l'})(2-\delta_{ll'}),$$

$$=\frac{1}{4k^2}\Big|\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(S_l-1)P_l(\cos\vartheta)\Big|^2, \tag{83}$$

ahol az $S_l\equiv e^{2i\delta_l}$ jelölést alkalmaztuk. (Potenciálszórás esetén ez az "$S-$mátrix" elem.)

A teljes hatáskeresztmetszet ennek teljes térre vett integrálja. Kihasználva a Legendre polinomok ortogonalitását, kapjuk:

$$\sigma_{tot}=2\pi\int_0^{\pi}\sin\vartheta d\vartheta\sigma(\vartheta)=\frac{4\pi}{k^2}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l. \tag{84}$$

Ezt összehasonlítva az előreszórás szórási amplitúdó imaginárius részére kapott előbbi képlettel, nyerjük

$$\sigma_{tot}=\frac{4\pi}{k}\Im f(0),$$

ami a már korábbról ismert általánosan érvényes optikai tétel újbóli kifejeződése a szférikus potenciálok speciális esetére. Az optikai tétel szemléletes fizikai jelentése a következő. Ahhoz, hogy szóródás bekövetkezzen, részecskét kell a beeső nyalábból eltávolítani, és ez nyilván a szórási hatáskeresztmetszettel arányos mértékű. A beeső nyaláb intezítása a szórási tartomány mögött ($\vartheta\approx 0$) kisebb, mint előtte. A gyengülés csak a bejövő és szóródó hullám interferenciája révén lehetséges. Az interferencia tag viszont lineáris a szórási amplitúdóban. Tehát az előreszórási tartományban ($\vartheta\approx 0$, ahol mindez lejátszódik) a szórási amplitúdó arányos kell legyen a hatáskeresztmetszettel.

A parciális hullámok módszerét nyilván akkor célszerű alkalmazni, ha csak kevés parciális hullám ad járulékot a szórásamplitúdóhoz. Ez akkor következik be, ha

1) a potenciál hatótávolsága (r_0) rövid, vagy ha

2) a szórási energia ($k^2/2$) kicsi.

Ugyanis $bp = L$ klasszikusan, ahol b az impakt paraméter, p az impulzus, L az impulzusmomentum, tehát

$$(r_0 \hbar k)^2 \sim \hbar^2 l_{max}(l_{max}+1).$$

6.4.1. FÁZISTOLÁS.

Az előzőekben lépten-nyomon használt $\delta_l = \delta_l(k)$ konstans neve: *fázistolás* (phase shift), mivel éppen a hullámfüggvény fázisának a szabad megoldáshoz képesti eltolódását jelenti a (79) ill. (81) egyenletek alapján. A fázistolásoknak a szóráselméletben centrális szerepük van, mert mint láttuk, e mennyiség ismerete elegendő a hatáskeresztmetszet meghatározásához. A fázistolás ugyanazt a szerepet játssza a szórási állapotok meghatározásában, mint az E_n energiasajátérték a kötött állapotok jellemzésében. Valóban, többféle összefüggés állapítható meg az energiasajátértékek és a fázistolások között, a zérus energiájú kötött állapotok, illetve a zérus energiájú szórás vizsgálata révén (Levinson tétel, kvantumdefekt elmélet, stb.).

Mint láttuk, a fázistolás ismerete egy normálási állandótól eltekintve egyértelműen rögzíti a szórási hullámfüggvény (a szórási állapot) aszimptotikus alakját. A szóráselméletben (a folytonos spektrumok tanulmányozása esetén) mindig ez érdekel bennünket, mivel a hullámfüggvény aszimptotikus alakja tartalmazza a szórásamplitúdót, aminek abszolút érték négyzete adja a kísérletekkel összevethető differenciális hatáskeresztmetszet értékeket.

Mármost az a (látszólagos) ellentmondásos helyzet állt elő, hogy tulajdonképpeni célunk, a mikrorészecskék (mikrorendszerek) közötti kölcsönhatás kifürkészésére felállított elméleti apparátus mintha nem érdeklődne a hullámfüggvény kis tartományú viselkedése iránt, noha a mikrokölcsönhatások nyilván itt fejtik ki hatásukat leginkább. Természetesen ez nincs így. Márcsak azért sem, mert a hullámfüggvényt egyértelműen meghatározza a köcsönhatást tartalmazó Schrödinger egyenlet a két határfeltétellel együtt. Azaz a hullámfüggvény aszimptotikus tulajdonságait, és így a fázistolást is, egy előre megadott potenciál egyértelműen rögzíti.

A fázistolás differenciális meghatározása.

A fázistolások a hullámfüggvény folytonossága alapján $V(r > r_0) = 0$ típusú potenciál esetén könnyen meghatározhatók, mivel az aszimptotikus (81a) $R_l^{(a)}(r > a)$ megoldásoknak és első deriváltjaiknak folytonosan kell csatlakoznia az $R_l(r \leq a)$ belső megoldásokhoz, ill. deriváltjaihoz. Ezen folytonossági (regularitási) feltételt a logaritmikus deriváltak

$$\gamma_l(k) \equiv \left(\frac{d}{dr}\left[\ln \frac{1}{r} R_l\right]\right)_{r=r_0} = \left(\frac{d}{dr}\left[\ln \frac{1}{r} R_l^{(a)}\right]\right)_{r=r_0} = \left(\frac{d}{dr} \ln\left[j_l(kr)\cos\delta_l - n_l(kr)\sin\delta_l\right]\right)_{r=r_0},$$

egyenlősége révén teljesül, amiből

$$\tan\delta_l = \frac{k j_l'(kr_0) - \gamma_l(k) j_l(kr_0)}{k n_l'(kr_0) - \gamma_l(k) n_l(kr_0)},$$

révén kapjuk a kívánt képletet, ahol $'$ az argumentum szerinti deriválást jelenti.

A fázistolás integrális származtatása.

Kiindulunk a (76d) és (80) alatti egyenletből, amelyeket a jelölés szerint beszorozva és integrálva

$$\int_0^\infty dr\, R_l^{reg}(r)/ \quad \left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} - U(r) + k^2\right] R_l(r) = 0,$$

$$\int_0^\infty dr\, R_l(r)/ \quad \left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2\right] R_l^{reg}(r) = 0,$$

két egyenletet kapunk, amelyeket egymásból kivonva nyerjük $[R_l^{reg} = rj_l(kr)$ és $R_l(r \to \infty) = \tilde{A}_l \sin(kr - l\pi/2 + \delta_l)]$:

$$\int_0^\infty [R_l^{reg} \frac{d^2}{dr^2} R_l - R_l \frac{d^2}{dr^2} R_l^{reg}] dr = \int_0^\infty R_l^{reg}(r) U(r) R_l(r)\, dr.$$

A baloldalon parciálisan integrálva és kihasználva az aszimptotikus alakokat, kapjuk a $-\tilde{A}_l k \sin\delta_l$ eredményt. Így a norma-független végeredmény:

$$\sin\delta_l = -\frac{2m}{\hbar^2} \tilde{A}_l^{-1} \int_0^\infty r j_l(kr) V(r) R_l(r)\, dr.$$

Összefüggés a potenciál és a fázistolás előjele között.

Vizsgáljuk most meg, hogy a δ_l fázistolás előjeléből lehet-e következtetést levonni a potenciálra vonatkozóan.

A reguláris szabad megoldás aszimptotikus alakja,

$$R_l^{reg}(r \to \infty) = \lim_{r\to\infty} r j_l(kr) = \sin(kr - \frac{1}{2} l\pi),$$

amiből a szabad megoldás nódusainak (csomópontjainak) helyére

$$kr_{sz} - l\pi/2 = 0 \to r_{sz} = l\pi/2k$$

adódik. A teljes megoldás aszimptotikájából

$$R_l^{(a)} = R_l(r \to \infty) = \tilde{A}_l \sin(kr - l\pi/2 + \delta_l)$$

viszont

$$kr_t - l\pi/2 + \delta_l = 0 \to r_t = l\pi/2k - \delta_l/k = r_{sz} - \delta_l/k$$

adódik.

Mármost tekintsük a (39) ábrát, amelyen feltüntettük a reguláris szabad megoldásokat (szaggatott vonal) és a teljes megoldásokat (folytonos vonal) vonzó ($V < 0$) és taszító ($V > 0$) potenciál esetére. Az ábrát tanulmányozva nyilvánvaló, hogy $\delta_l > 0$ vonzó, $\delta_l < 0$ taszító potenciál jelenlétére utal.

Fontos megjegyezni, hogy δ_l csak mod π erejéig van meghatározva, mivel periódikus függvények argumentumaiban fordul elő. Abszolút értékét $\delta_l(k \to \infty) = 0$ rögzíti. Bizonyítás nélkül megemlítjük, hogy e skálát használva, $\delta_l(k = 0) = n_l \pi$, ahol n_l a $V(r)$ potenciál által az $l-$ik parciális hullámban létesített kötött állapotok számát jelenti, amennyiben nincs zérus energián is kötött állapot (Levinson tétel).

Ramsauer-Townsend jelenség.

Vonzó potenciál esetén a fázistolás felveheti a π értéket. Ekkor a parciális hullám járuléka a szórásamplitúdóhoz (82) értelmében zérus. Rövidhatótávolságú potenciál esetén előfordulhat tehát az az eset, hogy $ka \sim l_{max} = 0$ miatt (ahol a a potenciál hatótávolsága) csak az $s-$hullám ad járulékot, ugyanakkor a potenciál eléggé vonzó ahhoz, hogy $\delta_0(k) = \pi$ legyen. Ekkor a hatáskeresztmetszet zérus: $\sigma_{tot}(k) \approx \frac{4\pi}{k}\sin^2\delta_0(k) = 0$. Ez a kvalitatív magyarázata az elektron-nemesgáz atomok szórási hatáskeresztmetszeteiben $0.1 - 0.7$ eV között megfigyelt minimumnak, amelyet először *Ramsauer* és *Townsend* észlelt a 30-as évek elején (40. ábra).

6.4.2. LIPPMANN-SCHWINGER (LS) EGYENLET. BORN SOROZAT.

Tekintsük a

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right]\psi^{(+)}_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}) = E\psi^{(+)}_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}) \qquad (85a)$$

szórási egyenletet $[E = (\hbar k)^2/2m]$ a

$$\lim_{r\to\infty}\psi^{(+)}_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_i\mathbf{r}} + f(\vartheta,\varphi)\frac{e^{+ikr}}{r} \qquad (85b)$$

határfeltétel mellett. (A hullámfüggvényen szereplő (+) index a kifutó aszimptotikára utal.)

Írjuk át a Schrödinger egyenletet a

$$(\nabla^2 + k^2)\psi^{(+)}_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}) = F^{(+)}_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}) \qquad (85c)$$

inhomogén alakba, ahol az inhomogenitási tag,

$$F^{(+)}_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}) = \frac{2m}{\hbar^2}V(\mathbf{r})\psi^{(+)}_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}), \qquad (85d)$$

tartalmazza a köcsönhatást is.

(85c) formális megoldása a *Lippmann-Schwinger* (LS) *integrálegyenlet:*

$$\psi^{(+)}_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_i\mathbf{r}} + \frac{2m}{\hbar^2}\int d\mathbf{r}' G^{(+)}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')V(\mathbf{r}')\psi^{(+)}_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}'), \qquad (86)$$

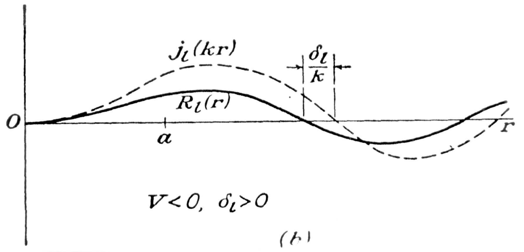
ahol a $G^{(+)}$ Green-függvényt a

$$(\nabla^2 + k^2)G^{(+)}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \equiv \frac{1}{(2\pi)^3}\int e^{i\mathbf{k}'(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}d\mathbf{k}' \qquad (87)$$

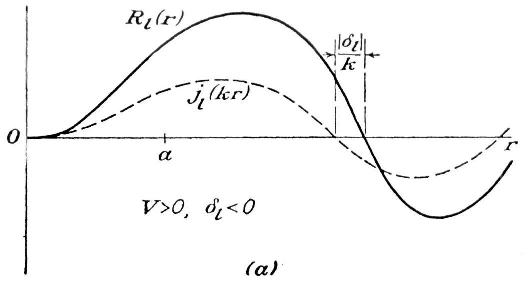
egyenlet definiálja.

Behelyettesítve (86)-ot (85c)-be, (87) kihasználásával azonosságot kapunk:

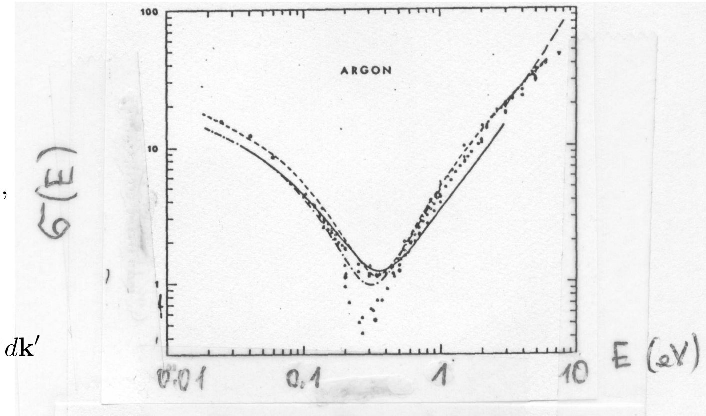
$$(\nabla^2_{\mathbf{r}} + k^2)\psi^{(+)}_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}) = (\nabla^2_{\mathbf{r}} + k^2)e^{i\mathbf{k}_i\mathbf{r}}$$



39/a. ábra. Vonzó potenciál pozitív fázistolást okoz.



39/b. ábra. Taszító potenciál negatív fázistolást okoz.



40. ábra. Ramsauer-Towsend minimum az $e - Ar$ szórás hatáskeresztmetszetében.

$$+\frac{2m}{\hbar^2}\int d\mathbf{r}'\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')V(\mathbf{r}')\psi^{(+)}_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}') =$$

$$(-k^2+k^2)e^{i\mathbf{k}_i\mathbf{r}} + \frac{2m}{\hbar^2}V(\mathbf{r})\psi^{(+)}_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}) = F_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r})$$

Kimutatjuk, hogy a LS egyenlet magában foglalja a szórási határfeltételeket is. Ehhez első lépésként kiszámítjuk $G^{(+)}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$-t a reziduum tétel segítségével. Alkalmazva (87) mindkét oldalára (∇^2+k^2) inverzét, kapjuk

$$G^{(+)}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = (\nabla^2+k^2)^{-1}\frac{1}{(2\pi)^3}\int e^{i\mathbf{k}'(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}d\mathbf{k}' = \frac{1}{(2\pi)^3}\int\frac{e^{i\mathbf{k}'(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{-k'^2+k^2}d\mathbf{k}' = -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}.$$

Az utolsó integrált komplex kontúrintegrálási technikával lehetett meghatározni, olyan utat választva, amely kifutó aszimptotikát biztosít a Green-függvény számára.

A Green-függvény eme konkrét alakját beírva a LS egyenletbe, kapjuk:

$$\lim_{r\to\infty}\psi^{(+)}_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_i\mathbf{r}} - \lim_{r\to\infty}\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d\mathbf{r}'\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}V(\mathbf{r}')\psi^{(+)}_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}')$$

$$= e^{i\mathbf{k}_i\mathbf{r}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{ikr}}{r}\int d\mathbf{r}'e^{-i\mathbf{k}_f\mathbf{r}'}V(\mathbf{r}')\psi^{(+)}_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}') \equiv e^{i\mathbf{k}_i\mathbf{r}} + f(\vartheta,\varphi)\frac{e^{ikr}}{r}. \quad Q.E.D.$$

Itt felhasználtuk a következő összefüggést és definíciót:

$$\lim_{r\to\infty}\left(k|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| = k\sqrt{r^2-2\mathbf{r}\mathbf{r}'+r'^2}\right) = kr\sqrt{1-2\mathbf{r}\mathbf{r}'/r^2} \approx kr(1-\mathbf{r}\mathbf{r}'/r^2) = kr - k\frac{\mathbf{r}}{r}\mathbf{r}' \equiv kr - \mathbf{k}_f\mathbf{r}'$$

Meghatároztuk egyúttal a *szórásamplitúdó integrális alakjá*t is:

$$f_{\mathbf{k}_i,\mathbf{k}_f}(\vartheta,\varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d\mathbf{r}'e^{-i\mathbf{k}_f\mathbf{r}'}V(\mathbf{r}')\psi^{(+)}_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}') \equiv -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\langle\Phi_{\mathbf{k}_f}|V\,\psi^{(+)}_{\mathbf{k}_i}\rangle.$$

Ebből a felírásból világosan látszik, hogy a szórásamplitúdó annak valószínűségét fejezi ki, hogy a szóródó rendszer (target+lövedék) a kezdeti (i) kölcsönható $\psi_{\mathbf{k}_i}$ állapotból a végső (f) nemkölcsönható, azaz szabad, $\Phi_{\mathbf{k}_f}$ állapotba kerül át a $V(\mathbf{r})$ kölcsönhatás eredményeként.

Levezetés nélkül közöljük a LS egyenlet parciális hullámú alakját, amely gömbszimmetrikus potenciál esetén érvényes:

$$u_l(k;r) = j_l(kr) + \int_0^\infty G_l(r,r')\frac{2m}{\hbar^2}V(r')u_l(r')r'^2\,dr',$$

ahol a Green-függvény az $l-$edik parciális hullámban:

$$G_l(r,r') = kj_l(kr_<)n_l(kr_>),$$

ahol $r_> = \max(r,r'), r_< = \min(r,r')$.

A LS egyenlet segítségével könnyen kiépíthető egy, a potenciál hatványai szerint haladó sorfejtésen alapuló, közelítő eljárás. Írjuk fel a LS egyenletet szimbolikus jelöléssel

$$\psi = \Phi_{\mathbf{k}_i} + GV\psi,$$

ahol GV nemlokális integráloperátort jelöl. A baloldalt folytonosan a jobboldalba helyettesítve, kapjuk a Born sorozatot:

$$\psi = \Phi_{\mathbf{k}_i} + GV\Phi_{\mathbf{k}_i} + GVGV\Phi_{\mathbf{k}_i} + ... \equiv \sum_{i=1}^{\infty} \psi_{Bi}.$$

A Born sorozatot felhasználhatjuk (gyenge potenciál, vagy nagy szórási energia esetén) az említett közelítő számítás kivitelezésére. Pl. az *első Born közelítést* kapjuk, ha ψ helyett ψ_{B1}-et használjuk. Így pl. a szórásamplitúdó első, ill. második Born közelítése

$$f_{B1}(\vartheta,\varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\langle\Phi_{\mathbf{k}_f}|V\,\psi_{B1}\rangle = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\langle\Phi_{\mathbf{k}_f}|V\,\Phi_{\mathbf{k}_i}\rangle,$$

$$f_{B2}(\vartheta,\varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\langle\Phi_{\mathbf{k}_f}|V\,(\psi_{B1}+\psi_{B2})\rangle = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\left(\langle\Phi_{\mathbf{k}_f}|V\,\Phi_{\mathbf{k}_i}\rangle + \langle\Phi_{\mathbf{k}_f}|VGV\,\Phi_{\mathbf{k}_i}\rangle\right).$$

Másik példaként a fázistolás első Born-közelítéses kifejezését írjuk fel. Kiindulva az integrális reprezentációból,

$$\sin\delta_l^{B1} = -\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^{\infty} drr^2 j_l(kr)V(r)j_l(r).$$

6.4.3. COULOMB SZÓRÁS. MÓDOSÍTOTT COULOMB SZÓRÁS.

Két, q_1e és q_2e töltéssel rendelkező részecske közt ható Coulomb potenciál

$$V_c = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{q_1q_2e^2}{r}$$

A hullámfüggvény aszimptotikus alakja Coulomb szórás esetén:

$$\lim_{r\to\infty}\psi_{\mathbf{k}_i}^{(+)} = e^{i\mathbf{k}_i\mathbf{r}+in\ln k(r-z)} + f_c(\vartheta)\frac{e^{ikr-in\ln 2kr}}{r},$$

ahol a Coulomb szórási amplitúdó analitikusan ismert:

$$f_c(\vartheta) = -\frac{n}{2k\sin^2\vartheta/2}e^{2i(\delta_0^c - n\ln\sin\vartheta/2)},$$

ahol n a Sommerfeld paraméter: $n = mq_1q_2e^2 4\pi/\hbar^2 k\varepsilon_0$, amelyben m a két részecske redukált tömegét jelenti és $\delta_0^c = \arg\Gamma(1+in)$.

A Coulomb szórás differenciális hatáskeresztmetszete tehát:

$$\sigma_c(\vartheta) = |f_c(\vartheta)|^2 = \frac{n^2}{4k^2\sin^4\frac{\vartheta}{2}}.$$

Ez a jól ismert Rutherford formula.

A Coulomb szórás teljes hatáskeresztmetszete végtelen: $\sigma_{tot}^c = \infty$. Ez annak folyománya, hogy az r^{-1}-es potenciál hosszúhatótávolságú. Még $l = \infty$-ed rendben is módosítja a parciális hullámok fázisait, azaz az egymástól ∞ távolságra levő részecskék is hatással vannak egymásra.

A parciális hullámokra felírt radiális Schrödinger egyenlet Coulomb potenciál esetén

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2} + V_c(r) - E\right]R_l(r) = 0.$$

Ennek két lineárisan független megoldása, az origóban reguláris, ill. irreguláris Coulomb hullámfüggvény :

$$\text{reg.}\qquad F_l(k;r) \to r^{l+1},\ \text{ha}\ r\to 0;\quad \to \sin(kr - \frac{1}{2}l\pi - n\ln 2kr + \delta_l^c),\ \text{ha}\ r\to\infty,$$

$$\text{irreg.}\qquad G_l(k;r) \to r^{-l},\ \text{ha}\ r \to 0; \qquad \to \cos(kr - \frac{1}{2}l\pi - n\ln 2kr + \delta_l^c),\ \text{ha}\ r \to \infty.$$

Itt a Coulomb szórás által okozott fázistolást $\delta_l^c = \arg\Gamma(l+1+in)$ jelenti. (A szórás végtelen hatótávolságára utal az aszimptotikus alak argumentumában előforduló logaritmikus tag is).

A fenti megoldások közismertek, konfluens hipergeometrikus függvényekkel kifejezhetők, kézikönyvekben megtalálhatók (ld. pl. Abramovitz).

Összefüggés a pozitív és negatív energiákhoz tartozó megoldások között.

Írjuk fel a radiális egyenletet az aszimptotikus ($r \to \infty$) tartományban:

$$R_l'' = \left(-k^2 + \frac{2m}{\hbar^2}V_c\right)R_l = \left(-k^2 + \frac{2nk}{r}\right)R_l.$$

Ennek megoldása $O(1/r^2)$ rendben:

$$R_l(r \to \infty) \propto e^{\pm i(kr - n\ln r)} \propto r^{ni}e^{ikr} = r^n e^{-\kappa r},$$

ahol az utolsó egyenlőség jel után a $k = i\kappa$ helyettesítést hajtottuk végre, amely negatív $E = k^2/2$ energiákra való áttérés esetén szükséges. Látjuk tehát, hogy a pozitív energiájú tartományból a negatív energiájúba való áttérés sima, ezenkívül visszakaptuk a hullámfüggvénynek a kötött állapotok esetén megismert exponenciálisan eltűnő aszimptotikus alakját. Az, hogy ez az átmenet ilyen sima két teljesen különböző fizikai jelenség (szórás és kötött állapot) között, messze nem magától értetődő, és a megoldások analitikus tulajdonságát tükrözi (ld. S-matrix elmélet, diszperziós relációk, stb.).

Módosított Coulomb szórás

Amennyiben a V_c Coulomb potenciál mellett még egy *rövidhatótávolságú* $\hat{V}$ is jelen van, módosított Coulomb szórásról beszélünk. Ebben az esetben tehát

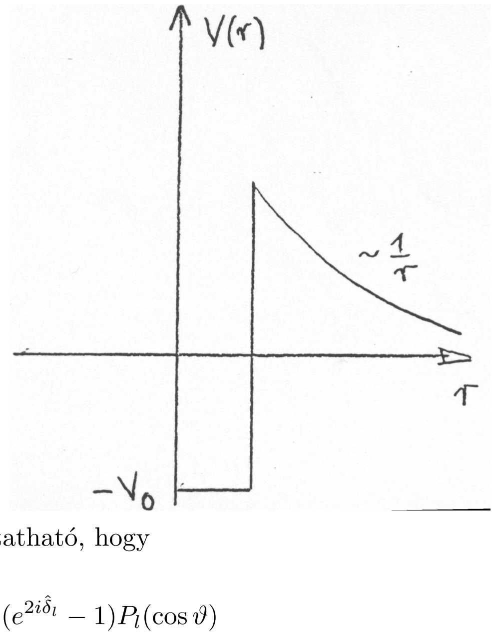
$$V = V_c + \hat{V},$$

ennek megfelelően a szórásamplitúdó:

$$f = f_c + \hat{f},$$

s a teljes fázistolás

$$\delta_l = \delta_l^c + \hat{\delta}_l.$$



Részletes, parciális hullámok szerinti analízissel megmutatható, hogy

$$\hat{f}(\vartheta) = \frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)e^{2i\delta_l^c}(e^{2i\hat{\delta}_l} - 1)P_l(\cos\vartheta)$$

ahol tehát $\hat{\delta}_l$ jelenti a rövidhatótávolságú potenciál okozta fázistolás (a Coulomb potenciál jelenléte mellett!).

A radiális hullámfüggvény a rövidhatótávolságú potenciál r_0 hatótávolságán kívül a Coulomb függvények lineáris kombinációjaként írható fel:

$$R_l(r > r_0) = F_l(k; r) + \tan \hat{\delta}_l G_l(k; r).$$

Ebből is meghatározható, hogy a módosított Coulomb szórás hullámfüggvényének aszimptotikus alakja:

$$\lim_{r \to \infty} \sin(kr - \frac{1}{2} l\pi - n \ln 2kr + \delta_l^c + \hat{\delta}_l).$$

Rutherford híres szóráskísérletével éppen a módosított Coulomb szórásnak megfelelő hatáskeresztmetszet értékeket mérte ki, s a tiszta Coulomb szórástól való eltérésből következtethetett az atommag atomon belüli méretére.