Rozptylová délka

Seminář o základech kvantové fyziky

25. října 2006

Rozptyl částice v centrálním potenciálovém poli

neutrony, elektrony,…

efektivní hmotnost částice μ

interakční potenciál $V(r)$

Schrödingerova rovnice

$$\left[\Delta + k^2\right]\psi(\vec{r}) = U(r)\psi(\vec{r})$$

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad , \quad U(r) = \frac{2\mu}{\hbar^2}V(r)$$

Integrální tvar rovnice

Pomocí řešení homogenní rovnice a singulární rovnice

$$\left[\Delta + k^2\right]\psi_0\left(\vec{r}\right) = 0$$

$$\left[\Delta + k^2\right]G\left(\vec{r} - \vec{r}^{\,\prime}\right) = -\delta\left(\vec{r} - \vec{r}^{\,\prime}\right)$$

přejdeme k integrálnímu tvaru Schrödingerovy rovnice

$$\psi\left(\vec{r}\right) = \psi_0\left(\vec{r}\right) - \int d^3\vec{r}^{\,\prime}\, G\left(\vec{r} - \vec{r}^{\,\prime}\right)U\left(\vec{r}^{\,\prime}\right)\psi\left(\vec{r}^{\,\prime}\right)$$

Rovinná a kulová vlna

$$\psi_0\left(\vec{r}\right) = \exp\left\{i\,\vec{k}\cdot\vec{r}\right\} \equiv \exp\left\{i\,k\,z\right\}$$

$$G\left(\vec{r}-\vec{r}^{\,/}\right) = \frac{\exp\left\{i\,k\left|\vec{r}-\vec{r}^{\,/}\right|\right\}}{4\,\pi\left|\vec{r}-\vec{r}^{\,/}\right|}$$

Fourierova transformace

$$F(\vec{\kappa}) = \int d^3\vec{r}\, \exp\{-i\vec{\kappa}\cdot\vec{r}\}\, G(\vec{r})$$

$$1 = \int d^3\vec{r}\, \exp\{-i\vec{\kappa}\cdot\vec{r}\}\, \delta(\vec{r})$$

Inversní Fourierova transformace

$$G(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3\vec{\kappa}\, \exp\{i\vec{\kappa}\cdot\vec{r}\}\, F(\vec{\kappa})$$

$$\delta(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3\vec{\kappa}\, \exp\{i\vec{\kappa}\cdot\vec{r}\}$$

Dosazení do Schrödingerovy rovnice dává

$$F\left(\vec{\kappa}\right)=\frac{1}{\kappa^2-k^2} \quad \Rightarrow$$

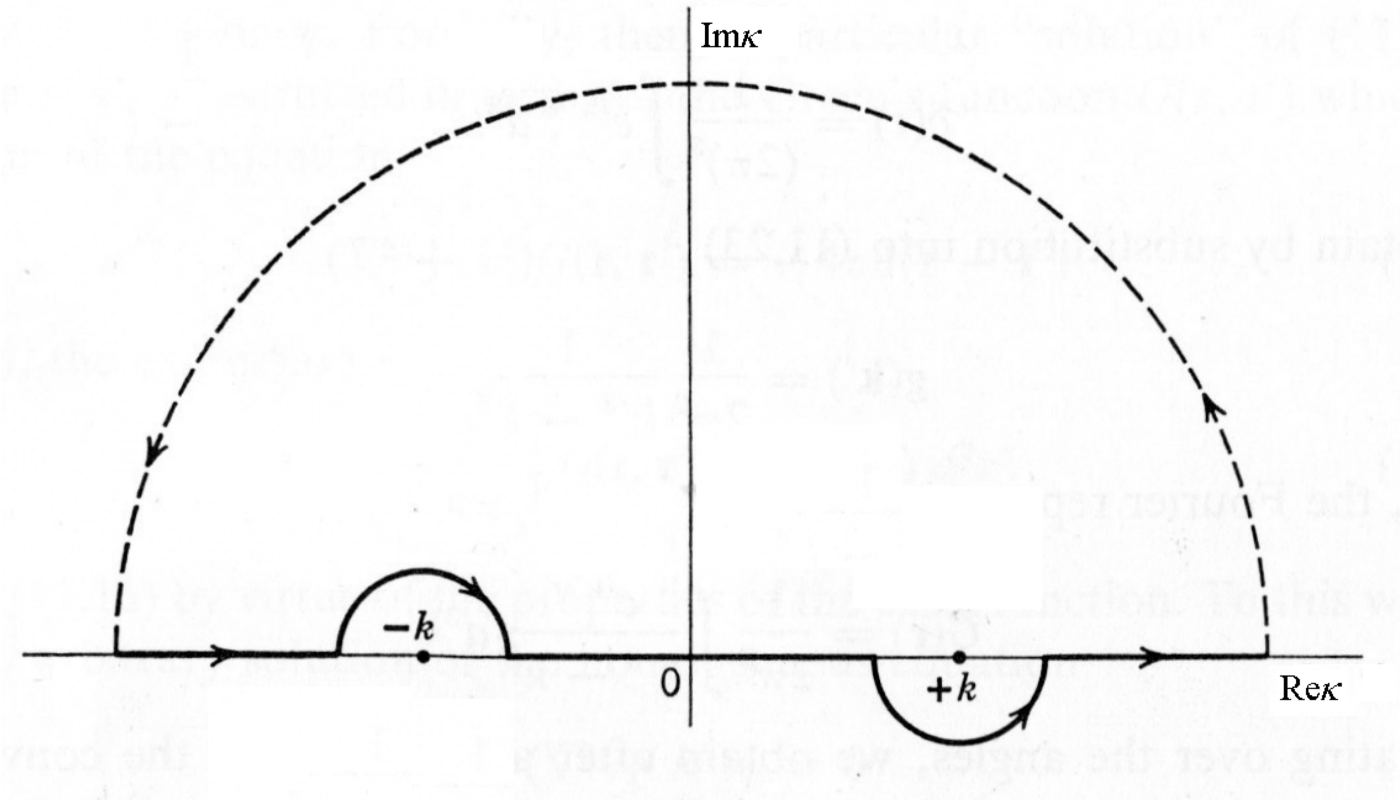
$$G\left(\vec{r}\right)=\frac{1}{\left(2\pi\right)^3}\int d^3\vec{\kappa}\exp\left\{i\vec{\kappa}\cdot\vec{r}\right\}\frac{1}{\kappa^2-k^2}$$

Standardní postup, tj.volba $\vec{r}=\left(0,0,r\right)$ vede na

$$G\left(r\right)=\frac{1}{2\pi^2 r}\int_0^\infty d\kappa\sin\kappa r\frac{\kappa}{\kappa^2-k^2}$$

Volba integrační cesty

$$G(r) = \frac{1}{4i\pi^2 r} \int_{-\infty}^{\infty} d\kappa \frac{\kappa \exp(i\kappa r)}{(\kappa + k)(\kappa - k)}$$



Residuová věta

$$\oint_C f(z)\,dz = 2\pi i \sum \left(residua\ f\ uvnitř\ C \right)$$

Residuum v $\kappa = k$ je $\dfrac{k\exp(ikr)}{2k}$ takže

$$G\left(\left|\vec{r}-\vec{r}'\right|\right) = \frac{\exp\left(ik\left|\vec{r}-\vec{r}'\right|\right)}{4\pi\left|\vec{r}-\vec{r}'\right|}$$

Explicitní tvar integrální rovnice

$$\psi\left(\vec{r}\right)=\exp\left\{i\,k\,z\right\}-\int d^3\vec{r}^{\,/}\,\frac{\exp\left(i\,k\left|\vec{r}-\vec{r}^{\,/}\right|\right)}{4\pi\left|\vec{r}-\vec{r}^{\,/}\right|}U\left(r^{/}\right)\psi\left(\vec{r}^{\,/}\right)$$

Pro $\left|\vec{r}-\vec{r}^{\,/}\right|\approx r-\vec{n}_f\cdot\vec{r}^{\,/}\quad,\quad\vec{n}_f=\frac{\vec{r}}{r}$ je pak

$$\psi\left(\vec{r}\right)=\exp\left\{i\,k\,z\right\}-$$

$$\frac{\exp\left(i\,k\,r\right)}{4\pi\,r}\int d^3\vec{r}^{\,/}\exp\left(-i\,k\,\vec{n}_f\cdot\vec{r}^{\,/}\right)U\left(r^{/}\right)\psi\left(\vec{r}^{\,/}\right)$$

Bornova aproximace

Dosadíme-li v integrandu za $\psi\left(\vec{r}^{\,/}\right)$ dopadající vlnu

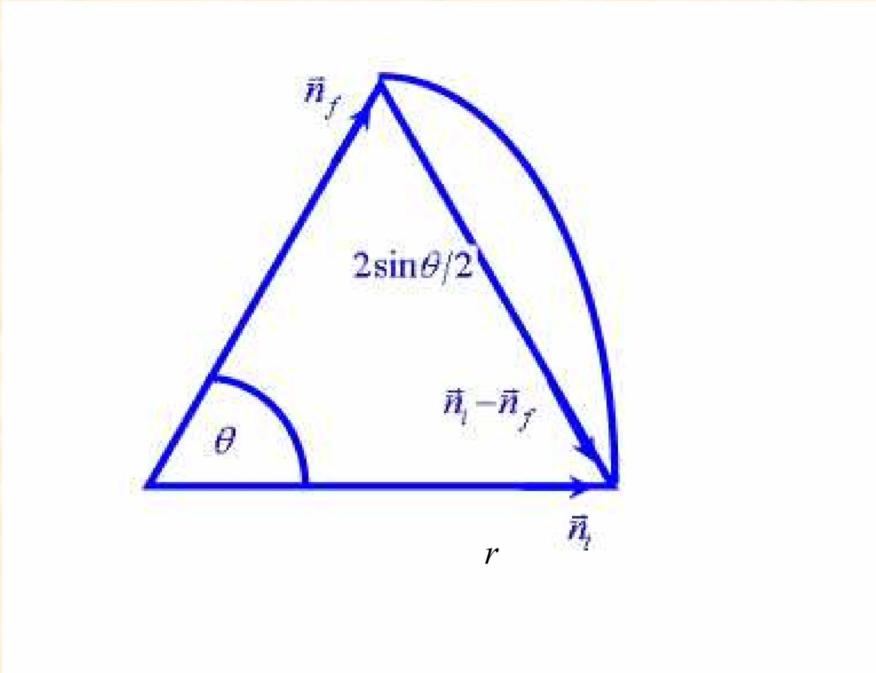
$$\psi\left(\vec{r}^{\,/}\right) \approx \exp\left(i\,k\,z^{/}\right) \equiv \exp\left(i\,k\,\vec{n}_i \cdot \vec{r}^{\,/}\right)$$

dostáváme tzv. Bornovu aproximaci. Je velmi názorná

$$\psi\left(\vec{r}\right) = \exp\left\{i\,k\,z\right\} - f\left(\theta\right)\frac{\exp\left(i\,k\,r\right)}{4\pi\,r}$$

$$f\left(\theta\right) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int d^3\vec{r}^{\,/}\exp\left(i\,k\left(\vec{n}_i - \vec{n}_f\right)\cdot\vec{r}^{\,/}\right)U\left(r^{/}\right)$$

Geometrie a platnost Bornovy aproximace



Odhad provedeme pro počátek souřadnic, tedy

$$\Delta = \frac{2\mu}{4\pi\hbar^2}\left|\int d^3\vec{r}^{\,\prime}\,\frac{\exp\left(i\left(k\,r^{\prime}+\vec{k}\cdot\vec{r}^{\,\prime}\right)\right)}{r^{\prime}}V\left(r^{\prime}\right)\right| \ll 1$$

Analýza podmínek platnosti BA

$$\Delta = \frac{\mu}{\hbar^2 k}\left|\int d r' \left[\exp\left(2 i k r'\right) - 1\right] V\left(r'\right)\right| \ll 1$$

Pro sférickou jámu poloměru R a výšky V je

$$\Delta = \frac{\mu V}{\hbar^2 k}\left|\int_0^R d r' \left[\exp\left(2 i k r'\right) - 1\right]\right|$$

$$= \frac{\mu V}{2 \hbar^2 k^2}\left|\exp\left(2 i k R\right) - 2 i k R - 1\right| \ll 1$$

S bezrozměrnými proměnnými

$$x = 2 k R \, , \; y = \left(2 \mu V R^2\right) / \hbar^2$$

Dvě možnosti

$$\Delta = \frac{y}{x^2}\left[x^2 + 2 - 2x\sin x - 2\cos x\right]^{1/2} \square\ 1$$

$$\frac{\mu V R}{\hbar^2 k} \square\ 1$$

$$x \square\ 1 \quad \Rightarrow \quad \Delta \approx \frac{y}{x} \qquad\qquad x \square\ 1 \quad \Rightarrow \quad \Delta \approx \frac{y}{x}$$

$$kR \square\ 1 \quad \frac{\mu V R}{\hbar^2 k} \square\ 1 \qquad\qquad kR \square\ 1 \quad \frac{\mu V R^2}{\hbar^2} \square\ 1$$

platí pro vysoké energie   platí pro nízké energie ??

Rozptylová délka

Charakteristickou veličinou interakce je tzv. rozptylová délka, definovaná jako

$$a = -\lim_{k \to 0} f(\theta) = \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d^3\vec{r}^{\,/}\, U\left(r^{/}\right)$$

Stejnou hodnotu dostaneme pro $\vec{n}_f = \vec{n}_i$, tj. amplitudu rozptylu dopředu $f(\theta = 0)$. To je snad jediná vada na kráse Bornovy aproximace – nesplňuje optický teorém.

$$\boxed{a \approx \frac{\mu V R^3}{\hbar^2}}$$

Fermiho pseudopotenciál pro n – p rozptyl

Potenciál:

$$R \sim 2 \cdot 10^{-15}\, m \quad , \quad V \sim 36\, MeV \approx 6 \cdot 10^{-12}\, J$$

Redukovaná hmotnost:

$$\mu = \frac{m_p m_n}{m_p + m_n} \approx 8 \cdot 10^{-28}\, kg$$

Termální neutrony

$$k = \frac{p}{\hbar} \sim \frac{\left(2 m_n k T\right)^{1/2}}{\hbar} \approx 3 \cdot 10^{10}\, m^{-1}$$

Podmínky nízkoenergiové aproximace

$$k\,R \ll 1 \qquad k\,R \approx 6\cdot 10^{-5}$$

$$\frac{\mu V\,R^2}{\hbar^2} \ll 1 \qquad \frac{\mu V\,R^2}{\hbar^2} \approx 2.5$$

Fermiho idea: škálování

$$a \approx \frac{\mu V\,R^3}{\hbar^2} = \frac{\mu V^*\,R^{*3}}{\hbar^2}$$

$$V^* = 10^{-6}\,V \quad , \quad R^* = 10^2\,R$$

Nízkoenergiová aproximace před a po škálování

$$V^{*} = 10^{-6}\, V \quad , \quad R^{*} = 10^{2}\, R$$

$$k\, R^{*} \approx 6 \cdot 10^{-3} \qquad k\, R \approx 6 \cdot 10^{-5}$$

$$\frac{\mu V^{*} R^{*2}}{\hbar^{2}} \approx 2.5 \cdot 10^{-2} \qquad \frac{\mu V R^{2}}{\hbar^{2}} \approx 2.5$$

$$a \approx \frac{\mu V R^{3}}{\hbar^{2}} = \frac{\mu V^{*} R^{*3}}{\hbar^{2}} = 5 \cdot 10^{-15}\, m$$

Fermiho pseudopotenciál

V porovnání s vlnovou délkou neutronu je i po přeškálování interakční poloměr velmi malý. Co kdyby se tedy interakční potenciál nahradil vhodně (tj. při zachování rozptylové délky) normovanou Diracovou funkcí?

$$U(\vec{r}) = \frac{2\pi\hbar^2}{\mu} a \frac{\delta(r)}{4\pi r^2}$$