Η στρατηγική της προσέγγισης του Born

Ν. Λυγερός

Η εξίσωση του Schrödinger έχει την εξής μορφή, όταν δεν εξαρτάται από το χρόνο: $-\frac{\hbar}{2m}\nabla^2\psi + V\psi = E\psi$ s

Μέσω της σύμβασης του Griffiths γράφουμε $\left(\nabla^2 + k^2\right)\psi = Q$

Όπου:

$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ και $Q = \frac{2m}{\hbar^2}V\psi$

Το νοητικό σχήμα της στρατηγικής της προσέγγισης του Born είναι η χρήση της ομοιότητας, το φαινομενικό επίπεδο της εξίσωσης του Schrödinger με την εξίσωση του Helmholtz. Αν θεωρήσουμε τη συνάρτηση του Green ως την απάντηση σε μια πηγή του τύπου της δέλτα – συνάρτησης, τότε μπορούμε να την ερμηνεύσουμε ως λύση της εξίσωσης του Helmholtz με τον εξής τρόπο. $\left(\nabla^2 + k^2\right)G(r) = \delta^3(r)$ και $\psi(r) = \int G(r - r_0)Q(r_0)d^3r_0$

Κατά συνέπεια, έχουμε και λύση της εξίσωσης του Schrödinger

$$\begin{aligned}\left(\nabla^2 + k^2\right)\psi(r) &= \int\left[\left(\nabla^2 + k^2\right)G(r - r_0)\right]Q(r_0)d^3r_0 \\ &= \int \delta^3(r - r_0)Q(r_0)d^3r_0 = Q(r)\end{aligned}$$

Έτσι η προετοιμασία της εφαρμογής της προσέγγισης του Born απαιτεί την επίλυση της εξίσωσης Helmholtz. Ένας τρόπος για να επιτευχθεί αυτός ο στόχος είναι η χρήση του μετασχηματισμού του Fourier, ο οποίος μετατρέπει διαφορικές εξισώσεις σε αλγεβρικές εξισώσεις.

Έστω

$$G(r) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int e^{isr}g(s)d^3s$$

Έχουμε:

$$\left(\nabla^2 + k^2\right)G(r) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int\left[\left(\nabla^2 + k^2\right)e^{isr}\right]g(s)d^3s$$

Όπως

$$\nabla^2 e^{isr} = -s^2 e^{isr} \qquad \text{και} \quad \delta^3(r) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int e^{isr} d^3 s$$

Η εξίσωση

$$\left(\nabla^2 + k^2\right) G(r) = \delta^3(r)$$

Παίρνει τη μορφή:

$$\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int (-s^2 + k^2) g(s) d^3 s = \frac{1}{(2\pi)^3}\int e^{isr} d^3 s$$

Άρα

$$g(s) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}\left(k^2 - s^2\right)} \qquad \text{και} \quad G(r) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int e^{isr}\frac{1}{\left(k^2 - s^2\right)} d^3 s$$

Αν το r είναι σταθερό, επιλέγουμε σφαιρικές συντεταγμένες (s, θ, φ) με πολικό άξονα r. Έτσι: $s.r = sr\cos\theta$

και το ολοκλήρωμα φ είναι εκφυλισμένο, ενώ το ολοκλήρωμα θ είναι απλό: $\int_0^{\pi} e^{isr\cos\theta}\sin\theta d\theta = \frac{2\sin(sr)}{sr}$

Συνεπώς, $G(r) = \frac{1}{4\pi^2 r}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{s\sin(sr)}{\left(k^2 - s^2\right)} ds$

Η μορφή του ολοκληρώματος μέσω της εκθετικής συνάρτησης είναι:

$$G(r) = \frac{i}{8\pi^2 r}\left[\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{se^{irs}}{(k+s)(s-k)} ds - \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{se^{-irs}}{(k+s)(s-k)} ds\right]$$

Μέσω μιγαδικής ανάλυσης, μπορούμε να υπολογίσουμε αυτά τα ολοκληρώματα με τον εξής τύπο:

$$\oint \frac{f(z)}{z - z_0} dz = 2\pi i f(z_0)$$

Το πρώτο ολοκλήρωμα υπολογίζεται με ένα άπειρο ημικύκλιο και μια προέκταση στην πραγματική ευθεία που εμπεριέχει μόνο ένα πόλο (+k) πρώτου βαθμού και βρίσκουμε το εξής αποτέλεσμα : $i\pi e^{ikr}$

Λόγω της συμμετρίας των μιγαδικών ολοκληρωμάτων, η συμβολή του δεύτερου ολοκληρώματος είναι: $-i\pi e^{ikr}$

Τελικά, βρίσκουμε ότι η συνάρτηση του Green έχει την ακόλουθη μορφή:

$$G(r) = -\frac{e^{ikr}}{4\pi r}$$

Αν προσθέσουμε μια λύση στην ομογενή εξίσωση του Helmholtz θα έχουμε και πάλι μια γενική λύση της εξίσωσης. Έτσι η γενική λύση της εξίσωσης του Schrödinger έχει τη μορφή:

$$\psi(r) = \psi(r_0) - \frac{m}{2\pi\hbar^2}\int \frac{e^{ik|r-r_0|}}{|r-r_0|} V(r_0)\psi(r_0)\, d^3 r_0$$

όπου ψ_0 είναι η λύση της ακόλουθης εξίσωσης του Schrödinger: $\left(\nabla^2 + k^2\right)\psi_0 = 0$

Αν θέλουμε να υπολογίσουμε τη συνάρτηση $\psi(r)$ σε μεγάλη απόσταση, θα έχουμε την εξής απλοποίηση:

$$\psi(r) \cong \psi_0(r) - \frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{ikr}}{r}\int e^{-ikr_0} V(r_0)\psi(r_0)\, d^3 r_0$$

Άρα μέσα στο σφαιρικό πλαίσιο θα έχουμε:

$$f(\theta,\varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2 A}\int e^{-ikr_0} V(r_0)\psi(r_0)\, d^3 r_0$$

Η προσέγγιση του Born θεωρεί ότι το επίπεδο κύμα δεν αλλοιώνεται από το δυναμικό άρα:

$$f(\theta,\varphi) \cong -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int e^{i(k'-k)r_0} V(r_0)\, d^3 r_0$$

Στην ειδική περίπτωση του μεγάλου μήκους κύματος η προσέγγιση του Born απλοποιείται ως εξής:

$$f(\theta,\varphi) \cong -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int V(r)\, d^3 r$$

Στην περίπτωση του σφαιρικά συμμετρικού δυναμικού έχουμε:

$$f\left(\theta\right) \cong -\frac{2m}{\hbar^2 k}\int_0^\infty rV(r)\sin(kr)dr$$