چند نکته formal درمورد معادله Lippmann-Schwinger (LS)

$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$

$\hat{H}_0$ describes the dynamics of the incoming particle beam.

$\hat{V}$ پتانسیل پراکندگی

بدون نقض کلیت $\quad \hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} \quad$ هامیلتونی ذره آزاد

<u>هدف</u>: یافتن $|\psi\rangle$ در معادله شرودینگر $\quad \hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$

نکته این بود که E ویژه مقدار هامیلتونی $\hat{H}_0$ است، با ویژه مقدار $\quad \hat{H}_0|\phi\rangle = E|\phi\rangle$

پس جواب formal برای $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$، از راه زیر به دست می‌آید

$$\hat{H}|\psi\rangle = (\hat{H}_0 + \hat{V})|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

$$\rightarrow \quad (E - \hat{H}_0)|\psi\rangle = \hat{V}|\psi\rangle$$

این یک معادله دیفرانسیل غیرهمگن است و جواب آن عبارت است از

$$\boxed{|\psi\rangle = |\phi\rangle + \frac{1}{E - \hat{H}_0}\hat{V}|\psi\rangle}$$

زیرا اگر عملگر $(E - \hat{H}_0)$ را در دو طرف معادله اثر دهیم

$$(E - \hat{H}_0)|\psi\rangle = (E - \hat{H}_0)|\phi\rangle + \hat{V}|\psi\rangle$$

$$= \cancel{(E - E)}|\phi\rangle + \hat{V}|\psi\rangle = \hat{V}|\psi\rangle \quad ∎$$

$$\hat{H}_0|\phi\rangle = E|\phi\rangle$$

- البته صرفاً جواب formal است و شاید اصلاً معکوسی برای عملگر $(E - \hat{H}_0)$ پیدا نشود یا اصلاً تعریف نشده باشد.
- برای جلوگیری از این مشکل $E \rightarrow E^+ = E + i\epsilon$ که این ما را می‌رساند به همان retarded Green's fct. که قبلاً داشتیم

$$\boxed{|\psi\rangle = |\phi\rangle + G_+^{(0)}\hat{V}|\psi\rangle \quad \text{with} \quad G_+^{(0)}(E) \equiv \frac{1}{E^+ - H_0}}$$

قبلاً دیدیم که می‌توان نمایش مناسبی از $G_+^{(0)}$ پیدا کرد، و این همان محاسبه‌ای بود که ما را رساند به

$$\psi_k(\vec{x}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} + \frac{e^{ikr}}{r} f_{\vec{k}}(\theta, \varphi)$$

با استفاده از

$$G_+^{(0)}(\vec{x} - \vec{x}') = -\frac{e^{ik|\vec{x} - \vec{x}'|}}{4\pi|\vec{x} - \vec{x}'|}$$

حل معادله (LS) با استفاده از iteration

$$|\psi\rangle = |\phi\rangle + G_+^{(0)}\hat{V}|\psi\rangle$$

$$\longrightarrow \quad |\psi\rangle^{(1)} = |\phi\rangle + G_+^{(0)}\hat{V}|\phi\rangle$$

$$|\psi\rangle^{(2)} = |\phi\rangle + G_+^{(0)}\hat{V}\left(|\phi\rangle + G_+^{(0)}\hat{V}|\phi\rangle\right)$$

$$= |\phi\rangle + G_+^{(0)}\hat{V}|\phi\rangle + G_+^{(0)}\hat{V}G_+^{(0)}\hat{V}|\phi\rangle$$

$$= \left(1 + G_+^{(0)}\hat{V} + G_+^{(0)}\hat{V}G_+^{(0)}\hat{V}\right)|\phi\rangle$$

$$|\psi\rangle^{(3)} = \sum_{n=0}^{3}\left(G_+^{(0)}\hat{V}\right)^3|\phi\rangle$$

...

$$\boxed{|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty}\left(G_+^{(0)}\hat{V}\right)^n|\phi\rangle = \frac{1}{1-G_+^{(0)}\hat{V}}|\phi\rangle}$$

$$= \frac{1}{G_+^{(0)}\left[(G_+^{(0)})^{-1}-\hat{V}\right]}|\phi\rangle = \frac{(G_+^{(0)})^{-1}}{(G_+^{(0)})^{-1}-\hat{V}}|\phi\rangle$$

$$\underset{(G_+^{(0)})^{-1} = E^+ - H_0}{=} \frac{E^+ - H_0}{E^+ - \hat{H}_0 - \hat{V}}|\phi\rangle = \frac{E + i\delta - \hat{H}_0}{E^+ - \hat{H}}|\phi\rangle$$

$$\underset{\hat{H}_0|\phi\rangle = E|\phi\rangle}{=} \frac{i\delta}{E^+ - \hat{H}}|\phi\rangle = i\delta\,\hat{G}_+|\phi\rangle$$

$$(E-\hat{H}_0)|\phi\rangle = 0$$

$$\Longrightarrow$$

$|\psi\rangle = i\delta G_+|\phi\rangle$ with $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$

$\hat{G}_+ =$ انتشارگر هملتنی

$$\hat{G}_+ = \frac{1}{E^+ - \hat{H}}$$

$$E^+ = E + i\delta$$

$$H_0|\phi\rangle = E|\phi\rangle$$

برگردیم به بسط مورد نظر

$$|\psi\rangle = |\phi\rangle + G_+^{(0)}\hat{V}|\phi\rangle + G_+^{(0)}\hat{V}G_+^{(0)}\hat{V}|\phi\rangle + G_+^{(0)}\hat{V}G_+^{(0)}\hat{V}G_+^{(0)}\hat{V}|\phi\rangle + \cdots$$

نکته ۱

$$|\psi\rangle = \left(1 + G_+^{(0)}\hat{V} + G_+^{(0)}\hat{V}G_+^{(0)}\hat{V} + \ldots\right)|\phi\rangle$$

$$= \Big(1 + G_+^{(0)}\big[\underbrace{\hat{V} + \hat{V}G_+^{(0)}\hat{V} + \hat{V}G_+^{(0)}\hat{V}G_+^{(0)}\hat{V} + \ldots}_{\equiv\,\hat{T}}\big]\Big)|\phi\rangle$$

مکانیک کوانتومی ۳ - صفحه ۱۰۳ - آبان ۱۳۹۷

$$|\psi\rangle = \left(1 + G_+^{(0)}\hat{T}\right)|\phi\rangle \qquad (\star)$$

$$\hat{T} \equiv \hat{V} + \hat{V}G_+^{(0)}\hat{V} + \hat{V}G_+^{(0)}\hat{V}G_+^{(0)}\hat{V} + \dots = \hat{V}\left(1 + G_+^{(0)}\hat{V} + (G_+^{(0)}\hat{V})^2 + \dots\right)$$

$$\hat{T} = \hat{V}\,\frac{1}{1 - G_+^{(0)}\hat{V}} \qquad \text{Transition Operator}$$

$$\text{or} \quad \hat{T} = \hat{V} + \hat{V}G_+^{(0)}\left(\hat{V} + \hat{V}G_+^{(0)}\hat{V} + \dots\right) = \hat{V} + \hat{V}G_+^{(0)}\hat{T}$$

نکته ۲:

از رابطه $(\star)$ می‌رسیم به

$$|\psi\rangle = |\phi\rangle + G_+^{(0)}\hat{T}|\phi\rangle$$

که اگر آن را با جواب formal معادله $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ مقایسه کنیم

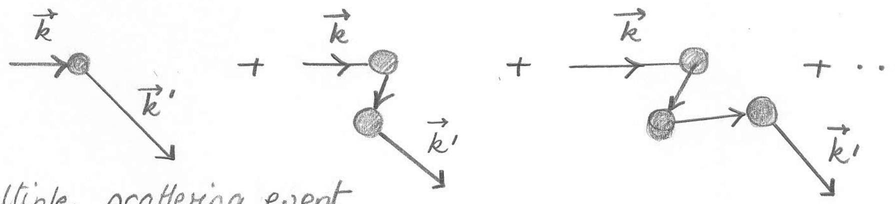
$$|\psi\rangle = |\phi\rangle + G_+^{(0)}\hat{V}|\psi\rangle$$

می‌رسیم به

$$\boxed{\hat{V}|\psi\rangle = \hat{T}|\phi\rangle}$$

نکته ۳:

$$|\psi\rangle = |\phi\rangle + G_+^{(0)}\hat{V}|\phi\rangle + G_+^{(0)}\hat{V}G_+^{(0)}\hat{V}|\phi\rangle + \dots$$



Multiple scattering event from the potential

نکته ۴: تقریب اول Born:

$$|\psi\rangle = \left(1 + G_+^{(0)}\hat{T}\right)|\phi\rangle$$

$$T(\vec{k}, \vec{k}') = \hat{V}(\vec{k}, \vec{k}')$$

تبدیل فوریه پتانسیل (همان که قبلاً بدست آمده بود).

قضیه اپتیکی به زبان عملگر گذار $\hat{T}$:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{x}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} + \frac{e^{ikr}}{r} f_{\vec{k}}(\theta, \varphi)$$

از مقایسه

$$\text{with} \quad f_{\vec{k}}(\theta, \varphi) = \frac{-m}{2\pi\hbar^2}\int d^3x'\, e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{x}'}\, V(\vec{x}')\,\psi_{\vec{k}}(\vec{x}')$$

$$|\psi\rangle = |\phi\rangle + G_+^{(0)}\hat{V}|\psi\rangle = |\phi\rangle + G_+^{(0)}\hat{T}|\phi\rangle$$

$$\hat{V}|\psi\rangle = \hat{T}|\phi\rangle$$

بنظر می‌رسد می‌توان قضیه‌ی زیر را در نظر گرفت:

$$f_k(\theta,\varphi) \equiv \frac{-m}{2\pi\hbar^2} \langle \vec{k}' | \hat{T} | \vec{k} \rangle$$

که در آن $|\phi\rangle = |\vec{k}\rangle$, $\langle \vec{x} | \vec{k} \rangle = e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$

• به این زبان

$$\boxed{\begin{aligned} |\psi\rangle &= |\vec{k}\rangle + G_+^{(0)} \hat{V} |\psi\rangle \\ \text{or} \quad &= |\vec{k}\rangle + G_+^{(0)} \hat{T} |\vec{k}\rangle \end{aligned}} \qquad (*)$$

$$\text{or} \quad |\vec{k}\rangle = |\psi\rangle - G_+^{(0)} T |\vec{k}\rangle = |\psi\rangle - G_+^{(0)} \hat{V} |\psi\rangle \qquad (*')$$

از طرفی

$$f_k(0) = \frac{-m}{2\pi\hbar^2} \langle \vec{k} | \hat{T} | \vec{k} \rangle = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \langle \vec{k} | \hat{V} | \psi \rangle$$

• با جایگذاری $(*')$ در رابطه بالا داریم:

$$f_{\vec{k}}(0) = \frac{-m}{2\pi\hbar^2} \left(\langle \psi | \hat{V} | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{V} G_+^{(0)} \hat{V} | \psi \rangle \right)$$

• در اینجا فرض شده است که $\hat{V}^+ = \hat{V}$

$$\rightarrow f_k(0) = \frac{-m}{2\pi\hbar^2} \left(\langle \psi | \hat{V} | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{V} \frac{1}{E^+ - \hat{H}_0} \hat{V} | \psi \rangle \right)$$

• استفاده می‌کنیم از:

$$\frac{1}{E^+ - \hat{H}_0} = \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon} = P\frac{1}{E - \hat{H}_0} + i\pi\,\delta(E - \hat{H}_0)$$

$$\begin{aligned} \operatorname{Im} f_k(0) &= \frac{+m}{2\pi\hbar^2}(+\pi) \langle \psi | \hat{V}\, \delta(E - \hat{H}_0) \hat{V} | \psi \rangle \quad \text{or} \\ &= \frac{+m}{2\pi\hbar^2}(\pi) \langle \vec{k} | \hat{T}^+ \delta(E - \hat{H}_0) \hat{T} | \vec{k} \rangle \\ &= \frac{+m\pi}{2\pi\hbar^2} \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} \langle \vec{k} | T^+ | \vec{k}' \rangle \langle \vec{k}' | \delta(E - \hat{H}_0) \hat{T} | \vec{k} \rangle \\ &= \frac{m\pi}{2\pi\hbar^2 (2\pi)^3} \int d\Omega\, k'^2 dk'\, \delta\!\left(\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k}^2 - \vec{k}'^2) \right) \\ &\qquad \times \langle \vec{k} | T^+ | \vec{k}' \rangle \langle \vec{k}' | \hat{T} | \vec{k} \rangle \\ &= \frac{m\pi}{(2\pi)^4 \hbar^2} \frac{2m}{\hbar^2} \int d\Omega\, k'^2 dk' \frac{1}{2k} \left(\delta(k - k') + \cancel{\delta(k + k')} \right) \\ &\qquad \times |\langle \vec{k}' | \hat{T} | \vec{k} \rangle|^2 \end{aligned}$$

• در اینجا استفاده کرده‌ام از

$$\delta(f(x)) = \sum_i \frac{\delta(x - x_i)}{\left| \frac{d}{dx} f(x) \right|_{x_i}}$$

نتیجه می‌دهد

$$\delta(\vec{k}^2 - \vec{k}'^2) = \frac{1}{2k}\left(\delta(k-k') + \delta(k+k')\right)$$

از آنجائیکه $|\vec{k}| = k$, $|\vec{k}'| = k'$ هر دو مثبت هستند، لازم نیست $\delta(k+k')$ در نظر گرفته شود

• بعد از انتگرال‌گیری روی k' می‌رسیم به

$$\operatorname{Im} f_k(0) = \frac{2m^2\pi}{(2\pi)^4 \hbar^4}\,\frac{k}{2}\int d\Omega\,\underbrace{|\langle \vec{k}'|\hat{T}|k\rangle|^2}_{=\left(\frac{-\hbar^2(2\pi)}{m}\right)^2 |f_{\vec{k}}(\theta,\varphi)|^2}$$

مطابق تعریف $f_k(\theta,\varphi)$

$$= \frac{k}{4\pi}\int d\Omega\,|f_{\vec{k}}(\theta,\varphi)|^2 = \frac{k}{4\pi}\int d\Omega\,\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{k}{4\pi}\sigma$$

$$\longrightarrow \boxed{\operatorname{Im}\left(f_{\vec{k}}(0)\right) = \frac{k}{4\pi}\sigma}$$

و این همان قضیه اپتیکی است