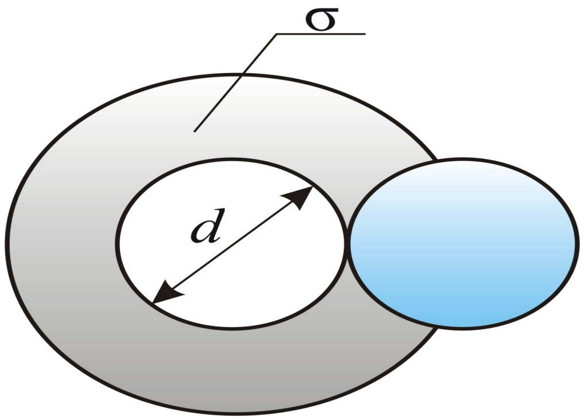
Плазмадағы соқтығысу процестерін кванттық механика тұрғысынан қарастыру. Борн жуықтауы.

Классикалық физика заттардың микроқұрылымын ескермейтін құбылыстарды түсіндіреді. Мысалға бізді қатты дененің қозғалысы тұтас бір жүйенің қозғалысы ретінде қарастыру қызықтырады, бірақ біз оның элементар бөлшектерден тұратындығын және де олардың да қозғалыстарын ескермей кетеміз. Плазма зарядталған және бейтарап бөлшектерден тұрады, сондықтан да оны толығымен зерттеу үшін осы мәселеге көңіл бөлінуі қажет.

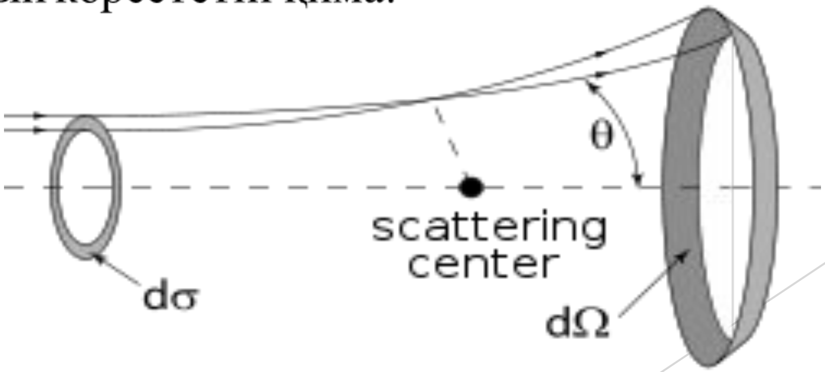
Плазма элементар бөлшектерден тұратындықтан онда әр-түрлі элементар процестер жүруі мүмкін, солардың бірі: бөлшектердің өзара соқтығысуы. Осы процесті зерттеу дегеніміз, соқтығысу қималарын анықтау дегенді білдіреді. Мұның бізге қажеті неде? деген сұрақ туындайды. Жалпы алғанда егер біз соқтығысу қималарын білсек, онда плазмадағы тасымалдану процестерін есептеп таба аламыз.

Шашырау қималары:

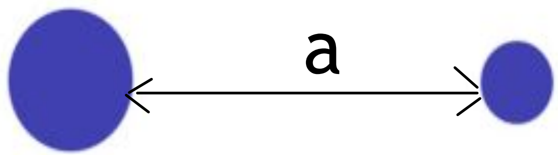
1. **Әсерлік қима (тиімді қима)-** ұшып келе жатқан бөлшектің соқтығысушы бөлшекпен қаншалықты әсерлі соқтығысу болатындығын сипаттайды. Былайша айтқанда шашыратушы центрі бар шеңбердің ауданы.



2. **Дифференциалдық шашырау қимасы-** соқтығысу нәтижесінде шашыраған бөлшектердің қандай да бір $d\Omega$-денелік бұрышта жатуының ықтималдылығын көрсететін қима.



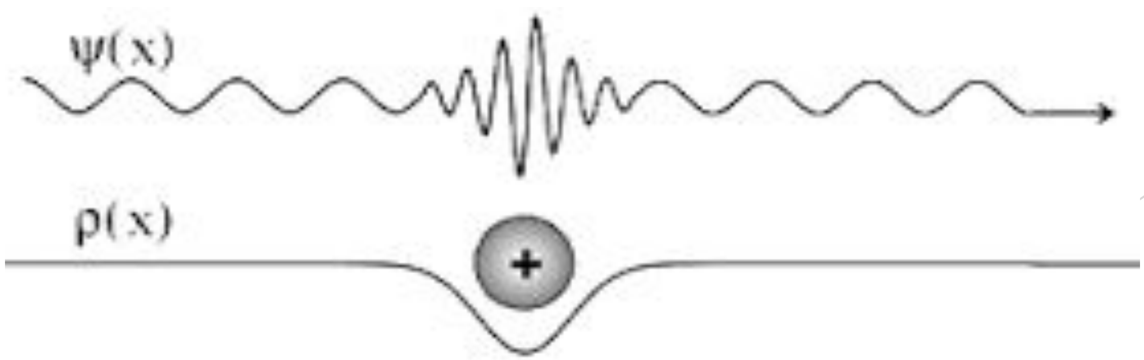
● **Шарт:** бөлшектердің орташа арақашықтықтары Де-Бройль толқын ұзындығына тең немесе одан кіші болғанда бөлшектердің толқындық қасиеті пайда болады. Бұл жағдайда біз шашырау теориясын кванттық механика тұрғысынан қарастырамыз.



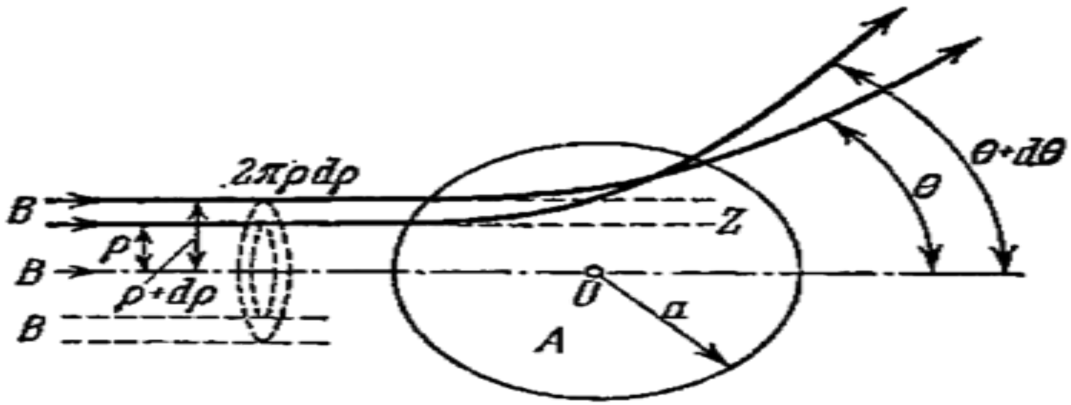
$$a \leq \lambda_{д.б}$$

● Кванттық механикада бөлшектердің күйін толқындық функциямен сипаттаймыз.

$\boldsymbol{\Psi}(\mathbf{r})$



● Шашыраудың классикалық теориясында бөлшектердің траекториясы мен координаттарын анықтай аламыз. Сондықтан көзделген параметр енгізе отырып, біз шашырауды есептеп табамыз.



Столкновение частицы B с атомом A по классической механике (случай отталкивания).

● Шашыраудың кванттық теориясында траектория ұғымы жоқ, сондықтан анықталмағандық принципі пайда болады: осы принципке сәйкес координат пен импульс бір мезгілде анықталмайды.

$$\Delta \mathbf{x} \cdot \Delta \mathbf{p} \geq \frac{\hbar}{2}$$

Кванттық механикада кез-келген құбылысты модельдеудің нәтижесі Шредингер теңдеуін шешуге алып келеді.

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta\Psi + U(r)\Psi = E\Psi \qquad (1)$$

Мұндағы:
E-ұшып келе жатқан бөлшектің қозғалыс энергиясы.
μ-бөлшектердің келтірілген массасы.
U(r)-шашыратушы күштік өріс.

(1)-теңдеуді $-\frac{2\mu}{\hbar^2}$ - қа көбейтеміз: $\Delta\Psi - \frac{2\mu}{\hbar^2}U(r)\Psi = -\frac{2\mu}{\hbar^2}E\Psi$

Теңдеудің 2-ші және 3-ші мүшелерін теңдіктің оң және сол жағына шығара отырып, мынадай белгіліеулер енгізіп (2)-түрдегі теңдеуді аламыз.

$$\Delta\Psi + \frac{2\mu}{\hbar^2}E\Psi = \frac{2\mu}{\hbar^2}U(r)\Psi$$

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

$$\Delta\Psi + k^2\Psi = V(r)\Psi \quad (2)$$

(2)-теңдеудің оң жағын 0-ге теңестіріп, $\Delta\mathbf{\Psi} + k^2\mathbf{\Psi} = 0$ теңдеуін шешейік:

$\mathbf{\Psi}'' + k^2\mathbf{\Psi} = 0$ 2-ші ретті дифференциалдық теңдеуді, λ-параметрін енгізе отырып, ретін төмендету тәсілімен шешеміз:

$$\lambda^2 + k^2 = 0$$

$$\lambda^2 = -k^2$$

$$\lambda_{1,2} = \sqrt{-k^2}$$

$$\mathbf{\Psi}_0(r) = \exp(i\vec{k}\vec{r}) \quad (3)$$

(3) функция (2) теңдеудің дербес шешімі. Ол жазық толқынды көрсетеді.

Соқтығысқа дейінгі ұшып келе жатқан бөлшектер ағынын келесі өрнекпен анықталады:

$$\vec{J}_0 = \frac{\hbar}{2\mu i}(\mathbf{\Psi}^*{}_0\nabla\mathbf{\Psi} - \mathbf{\Psi}_0\nabla\mathbf{\Psi}^*{}_0) = \frac{\hbar}{2\mu i}\left(e^{-ikr}\cdot\frac{d}{dr}e^{ikr} - e^{ikr}\cdot\frac{d}{dr}e^{-ikr}\right) =$$

$$\frac{\hbar}{2\mu i}\left(\cancel{e^{-ikr}}\cdot ik\cancel{e^{ikr}} - \cancel{e^{ikr}}\cdot(-ik)\cdot\cancel{e^{-ikr}}\right) = \frac{\hbar}{2\mu i}\cdot 2ik = \frac{\hbar\vec{k}}{\mu}$$

(4)

(1)-теңдеудің оң жағындағы функцияны белгілі деп есептесек , оның шешуін былай жазуға болады:

$$\mathbf{\Psi} = \mathbf{\Psi}_0(r) - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int \frac{\exp(ik|\vec{r}-\vec{r}\,'|)}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|} U(\vec{r}\,')\mathbf{\Psi}(\vec{r}\,')dx'dy'dz' \qquad (5)$$

Күш әсері облысы радиусынан әлдеқайда үлкен қашықтықтарда $k|\vec{r}-\vec{r}\,'| \approx kr - k\frac{\vec{r}\vec{r}\,'}{r} = \left|\vec{k}' = k\frac{\vec{r}}{r}\right| = kr - \vec{k}'\vec{r}\,'$, сондықтан $\mathbf{\Psi}$ функциясының асимтотикалық мәні

$$\mathbf{\Psi}(\mathrm{r}) = \mathbf{\Psi}_0(r) + A_{k'k}\frac{e^{ikr}}{r} \equiv \mathbf{\Psi}_0 + \mathbf{\Psi}_s \qquad (6)$$

Мұндағы $A_{k'k} = \frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int e^{ikr'}U(\vec{r}\,')\mathbf{\Psi}(\vec{r}\,')dx'dy'dz'$ -шашырау амплитудасы деп аталады.

Шашырау үдерісін сипаттау үшін дифференциалдық қима деген шама ендіріледі. $dS = r^2 d\Omega$ бет элементі арқылы бірлік уақытта $J_S \cdot r^2 d\Omega$ бөлшектер өтеді.

Шашыраған бөлшектер ағынының радиал тығыздығы:

$$J_s = \frac{\hbar}{2\mu i}(\mathbf{\Psi}^*{}_s \nabla \mathbf{\Psi}_s - \mathbf{\Psi}_s \nabla \mathbf{\Psi}^*{}_s) = \frac{\hbar k'}{\mu r^2}|A_{k'k}(\theta)|^2 \qquad (7)$$

(4)-өрнекті ескере отырып

$$d\sigma = \frac{J_S \cdot r^2 d\Omega}{J_0} = \frac{\frac{\hbar k'}{\mu r^2}|A_{k'k}(\theta)|^2 \cdot r^2 d\Omega}{\frac{\hbar \vec{k}}{\mu}} = \frac{k'}{k}|A_{k'k}(\theta)|^2 d\Omega \qquad (8)$$

Абсолют серпімді шашыратылу кезінде $k' = k$

Борн жуықтауы.

(8)-өрнекке сәйкес дифференциалдық шашырау қимасы нәтижесінде тек қана амплитуданың квадратына ғана тәуелді болып шықты. Осы амплитуданың өрнегін алу үшін біз Борн жуықтауын қолданамыз.

$$\mathrm{A}_{k,k'} = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int e^{i\vec{k}\vec{r}'}U(\vec{r}')e^{i\vec{k}_0\vec{r}'}\,dx'dy'dz' +$$

$$\left(\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\right)^2\int \boldsymbol{\Psi}^*{}_0(r)\,\frac{e^{i\vec{k}|\vec{r}-\vec{r}'|}}{\vec{r}-\vec{r}'}U(\vec{r})U(\vec{r}')\boldsymbol{\Psi}_0(\vec{r}')dxdydz\,dx'dy'dz'+\ldots. \qquad (9)$$

Егер әсерлесу энергиясын аз деп есептесек, онда: 1-ші Борн жуықтауын қолданып, келесіні аламыз:

$$\mathrm{A}_{k,k'} = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int e^{i\vec{k}\vec{r}'}U(\vec{r}')e^{i\vec{k}_0\vec{r}'}\,dx'dy'dz' \qquad (10)$$

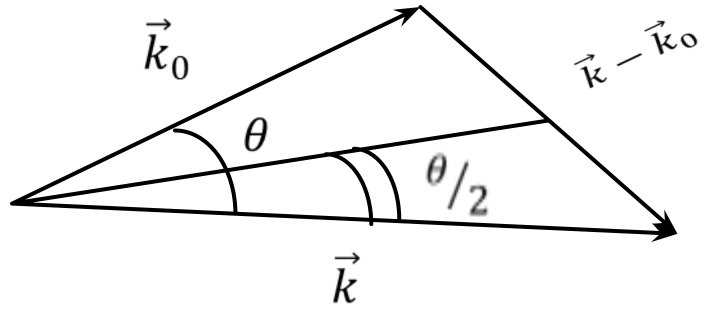
Осы жуықтауға сәйкес дифференциалдық қима:

$$d\sigma = \left(\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\right)^2\left|\int e^{i\vec{k}\vec{r}}U(\vec{r}')e^{i\vec{k}_0\vec{r}}\,dx'dy'dz'\right|^2 d\Omega \qquad (11)$$

(11)-ші өрнектегі интегралды өрнектеп жазсақ:

$$\int U(\vec{r}')e^{i(\vec{k}-\vec{k}_0)\vec{r}'}dx'dy'dz' \equiv U(\vec{k}-\vec{k}_0) \qquad (12)$$

Серпімді шашырау кезінде:



$$\left|\vec{k}\right| = \left|\vec{k}_0\right| \qquad \left|\vec{k}-\vec{k}_0\right| = 2ksin\frac{\theta}{2} \tag{13}$$

U($\vec{r}$)-сфералық-симметриялық өріс болса, онда (11) өрнектегі интегралды бұрыштық айнымалы арқылы жазуға болады:

$$d\sigma = (\frac{\mu}{2\pi\hbar^2})^2\left|U(\vec{k}-\vec{k}_0)\right|^2 d\Omega \tag{14}$$

$$U\left(\vec{k}-\vec{k}_0\right) = \frac{4\pi}{\vec{k}-\vec{k}_0}\int_0^\infty U(r)rsin\left(\left|\vec{k}-\vec{k}_0\right|r\right)dr$$

$$q = \left|\vec{k}-\vec{k}_0\right| = 2ksin\frac{\theta}{2} \longrightarrow U\left(\vec{k}-\vec{k}_0\right) = \frac{4\pi}{q}\int_0^\infty U(r)rsin(qr)dr \tag{15}$$

(15) өрнекті ескеріп, сфералық координаттар жүйесінде (себебі өрісімізді сфералық-симметриялық деп қарастырамыз) (14) өрнек мынадай түрге келеді:

$$d\sigma = \underbrace{\left(\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \left|U(\vec{k}-\vec{k}_0)\right|^2}_{\left(-A_{k,k'}\right)^2} d\Omega = \left(-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\cdot\frac{4\pi}{q}\int_0^\infty U(r) r sin(qr) dr\right)^2 d\Omega$$

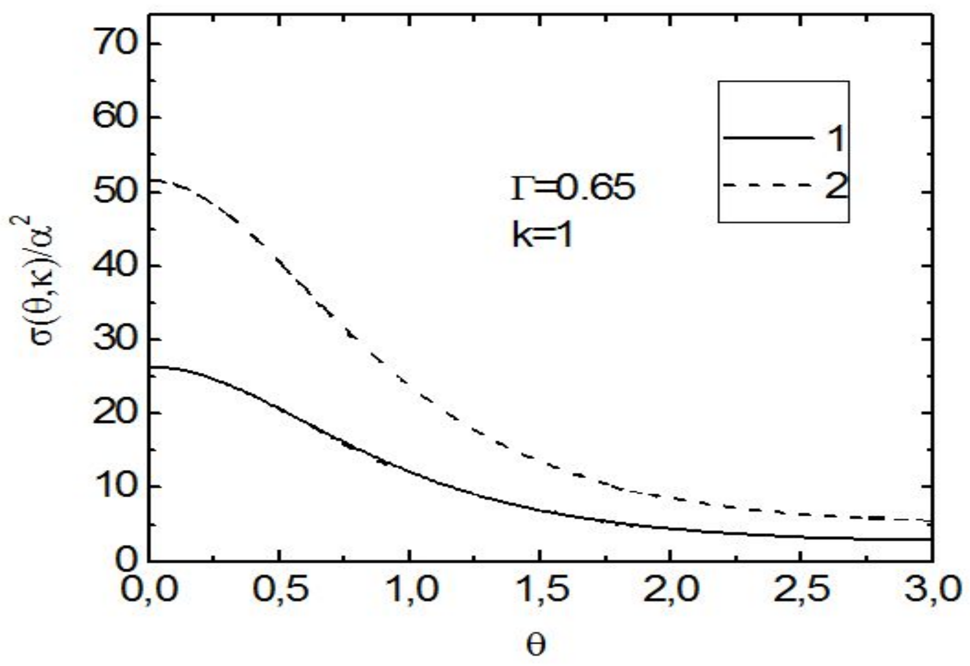
Сонда нәтижесінде өрнектей келе амплитуданың мынадай формуласын аламыз:

$$A_{k,k'} = -\frac{2\mu}{\hbar^2 q} = \int_0^\infty U(r) r sin(qr) dr \qquad (16)$$

Мұндағы $U(r)$-бөлшектердің өзара әсерлесу потенциалдары. Өзіміз білетіндей плазмадағы бөлшектер бір-бірімен алыс қашықтықтарда Кулон, экрандалу эффектісін ескеретін Дебай, дифракция құбылысын ескеретін Дойче потенциалдарымен әсерлеседі. Осы потенциалдардың өрнегін (16)-ға қойсақ, біз амлитуданы анықтап аламыз да, сосын оны дифференциалдық қиманы табу үшін қолданамыз.

Дебай потенциалы үшін алынған дифференциалдық қиманың өлшемсіз түріне келтіріліп, r_s-тің екі (5 және7) мәндері үшін тұрғызылған графигі.

$$d\sigma(\theta) = \frac{4m^2 (Z_1 Z_2)^2 e^4}{(\hbar^2 / r_d^2 + 4p^2 \sin^2(\theta/2))^2} \xrightarrow{\text{Өлшемсіз түрі}} \sigma(\theta) = \frac{4{r_s}^2}{\left(3G + 4k' \sin^2 \theta/_2\right)^2}$$

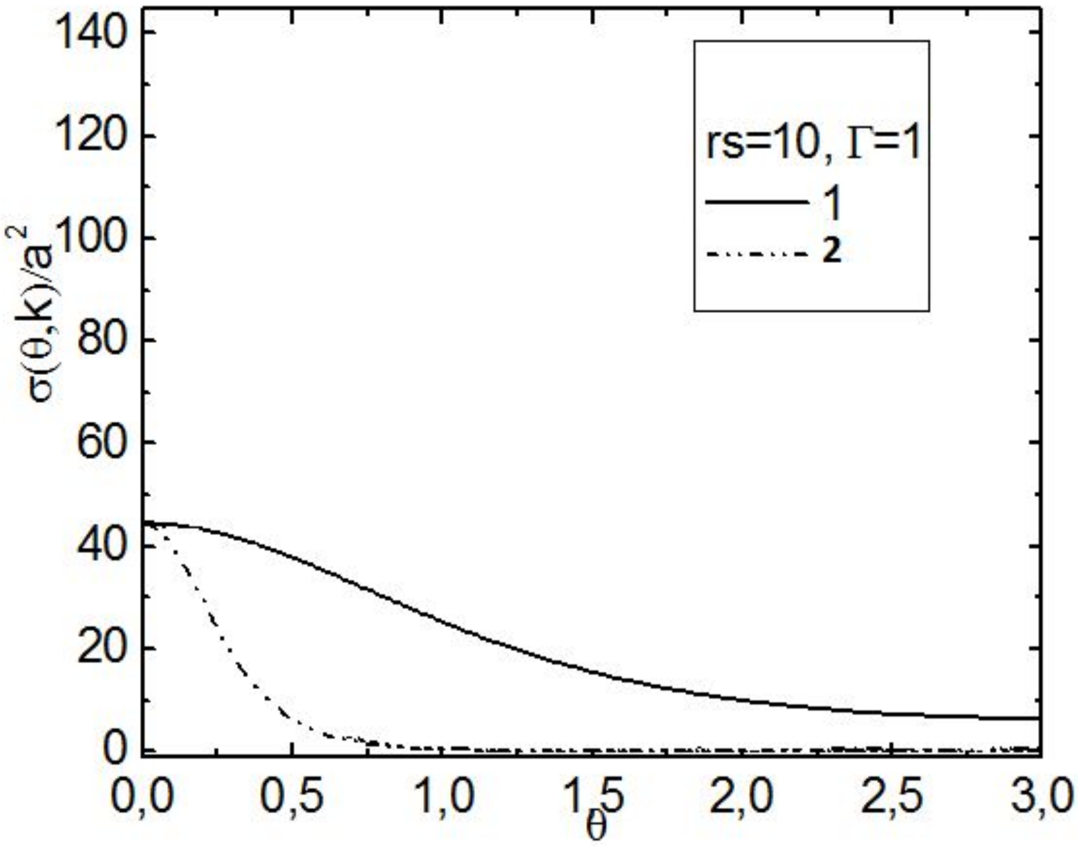


1 – сечение рассеяния, полученное на основе потенциала

2 - сечение рассеяния, полученное на основе потенциала

Графиктен көріп отырғанымыздай тығыздық параметрі өскенде шашырау ықтималдылығы артады (2 қисық) , оның себебі тығыздық параметрі артқанда бөлшектердің дәл соқтығысуы, және шашырау кеңістігі көп болады. Ал бөлшектер неғұрлым бір-біріне жақындаса, яғни тығыздығы артып кетсе (тығыздық параметрі азайғанда) керісінше шашырау ықтималдылығы азаяды, себебі бұл жағдайда кеңістік тар, сол себепті де рекомбинация процесі жүріп кетуі мүмкін немесе мысалға электрондар атоммен соқтығысқанда оның ішіне еніп, бір деңгейден екіншісіне секіріп жүргендей болады.

k ның әр-түрлі екі мәні (1-k=1, 2-k=4) үшін Дебай потенциалынан алынған дифференциалдық қиманың графигі.



Графикте k артқанда шашырау ықтималдылығы азаяды, себебі k өлшемсіз парамтрі бөлшектің жылдамдығын сипаттайды, яғни k өскенде бөлшектің жылдамдығы да артып ол шашыратушы өрістің күшін елемей өтіп кетеді. Ал егер k аз болса, онда оның жылдамдығы өрісті жеңе алмай шашырайды.