29 Rozpraszanie, przekrój czynny, twierdzenie optyczne

29.1 Przekrój czynny

Rozpraszanie przyjęło się charakteryzować za pomocą różniczkowego przekroju czynnego. Aby zdefiniować przekrój czynny przypomnijmy sobie najpierw tzw. równanie ciągłości

$$\frac{\partial}{\partial t}P(\vec{r},t)+\vec{\nabla}\cdot\vec{S}=0,$$

gdzie $P=|\psi|^2$ jest gęstością prawdopodobieństwa a wektor $\vec{S}$

$$\vec{S}=-\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^*\,\vec{\nabla}\psi-\psi\,\vec{\nabla}\psi^*\right) \tag{29.1}$$

nosi nazwę gęstości *prądu prawdopodobieństwa*. Wektor $\vec{S}$ ma wymiar $cm/\left(s\times cm^3\right)=1/\left(s\times cm^2\right)$. Opisuje on zatem liczbę cząstek padających w kierunku $\vec{S}/\left|\vec{S}\right|$ na jednostkę powierzchni, na jednostkę czasu. Wygodnie jest jednak przyjąć normalizację, w której funkcja falowa jest bezwymiarowa. Taką normalizację przyjęliśmy we wzorze

$$\psi(\vec{r})=u_i(\vec{r})+A_{fi}\times\frac{e^{ikr}}{r} \tag{29.2}$$

(brak czynnika normalizacyjnego przy u_i). Wówczas wektor $\vec{S}$ opisuje liczbę cząstek padających w jednostce czasu.

Przez element powierzchni $r^2d\Omega$ przechodzi w ciągu sekundy N_f cząstek rozproszonych

$$N_f=S_f^r r^2 d\Omega \tag{29.3}$$

gdzie S_f^r jest składową radialną gęstości prądu prawdopodobieństwa dla funkcji falowej ψ_f opisującej cząstki rozproszone

$$S_f^r=-\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi_f^*\frac{\partial\psi_f}{\partial r}-\psi_f\frac{\partial\psi_f^*}{\partial r}\right)=\frac{\hbar k}{mr^2}\left|A_{fi}\right|^2. \tag{29.4}$$

gdyż funkcja falowa cząstek rozproszonych to

$$\psi_f=A_{fi}\frac{e^{ikr}}{r}. \tag{29.5}$$

Zwróćmy uwagę, że w przyjętej przez nas normalizacji A_{fi}ma wymiar [cm].

Całkowita liczba cząstek padających na jednostkę czasu dana jest wzorem:

$$N_i=\left|\vec{S}_i\right|=\frac{\hbar k_i}{m}. \tag{29.6}$$

Różniczkowy przekrój czynny definiujemy jako

$$d\sigma(\theta,\varphi)=\frac{N_f}{N_i}=\frac{S_r r^2 d\Omega}{\left|\vec{S}_i\right|}=\frac{k}{k_i}\left|A_{fi}\right|^2 d\Omega \tag{29.7}$$

przy czym dla rozpraszania elastycznego (z zachowaną energią) mamy

$$\frac{d\sigma(\theta,\varphi)}{d\Omega} = \left|A_{fi}(\theta,\varphi)\right|^2 . \tag{29.8}$$

Różniczkowy przekrój czynny jest wyrażoną w jednostkach powierzchni miarą prawdopodobieństwa rozproszenia pod kątem θ i φ. Zauważmy na koniec, że gdybyśmy przyjęli inną normalizację funkcji falowej, to i tak uprościła by się ona we wzorze (29.7)

29.2 Fale kuliste

W rozdziale tym zajmiemy się rozpraszaniem na potencjale sferycznie symetrtycznym $V(r)$. Dla ruchu o dodatniej energii $E = \hbar^2k^2/2m$ radialne równanie Schrödingera ma postać:

$$\frac{d^2}{dr^2}R_{kl} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}R_{kl} + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2m}{\hbar^2}V(r)\right)R_{kl} = 0, \tag{29.9}$$

a pełna funkcja falowa dana jest wzorem

$$\psi_{klm}(\vec{r}) = R_{kl}(r)Y_l^m(\theta,\varphi). \tag{29.10}$$

Na funkcje te narzucimy warunek unormowania

$$\int d^3r\,\psi^*_{k'l'm'}\psi_{klm} = \delta_{ll'}\delta_{mm'}\,2\pi\delta(k-k'), \tag{29.11}$$

co tłumaczy się na funkcje radialne

$$\int\limits_0^\infty dr\,r^2R_{k'l}R_{kl} = 2\pi\delta(k-k') \tag{29.12}$$

(zauważmy, że na mocy unormowania f. kulistych $l = l'$).

Rozwiążmy równanie (29.9) dla cząstki swobodnej, czyli dla $V \equiv 0$. Jest to w tym przypadku tzw. sferyczne równanie Bessela. Jego rozwiązania są znane jako sferyczne funkcje Bessela $j_l(kr)$ i można otrzymać je przez rozwiązanie w postaci szeregu. My jednak rozwiążemy je przy pomocy tricku z podręcznika Landaua i Lifszica.

W przypadku $l = 0$ równanie (29.9) można przepisać

$$\frac{d^2}{dr^2}(rR_{k0}) + k^2(rR_{k0}) = 0. \tag{29.13}$$

Równanie to ma dwa rozwiązania:

$$rR = \sin kr \qquad \text{lub} \qquad rR = \cos kr. \tag{29.14}$$

Zatem rozwiązanie skończone w zerze i unormowane ma postać

$$R_{k0} = 2\frac{\sin kr}{r}. \tag{29.15}$$

Rozwiązanie to znane jest w literaturze matematycznej jako zerowa sferyczna funkcja Bessel'a pierwszego rodzaju

$$j_0(x) = \frac{\sin x}{x} \tag{29.16}$$

a drugie rozwiązanie osobliwe w zerze nosi nazwę sferycznej funkcji Bessel'a drugiego rodzaju.

$$y_0(x) = -\frac{\cos x}{x} \tag{29.17}$$

Dla $l \neq 0$ podstawmy

$$R_{kl} = r^l \chi_{kl}. \tag{29.18}$$

Wówczas

$$\chi''_{kl} + \frac{2(l+1)}{r}\chi'_{kl} + k^2\chi_{kl} = 0. \tag{29.19}$$

Zróżniczkujmy równanie (29.19) po r:

$$\chi'''_{kl} + \frac{2(l+1)}{r}\chi''_{kl} + \left(k^2 - \frac{2(l+1)}{r^2}\right)\chi'_{kl} = 0. \tag{29.20}$$

Dokonajmy teraz podstawienia

$$\chi'_{kl} = r f_{kl} \tag{29.21}$$

i podstawmy do równania (29.20):

$$f''_{kl} + \frac{2(l+2)}{r}f'_{kl} + k^2 f_{kl} = 0. \tag{29.22}$$

Zauważmy, że jest to równanie identyczne z równaniem (29.19) dla $l \to l+1$. A zatem

$$f_{kl} = \chi_{k\,l+1}$$

czyli

$$\chi_{k\,l+1} = \frac{1}{r}\chi'_{kl}. \tag{29.23}$$

Stąd rekurencja

$$\chi_{kl} = \left(\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\right)^l \chi_{k0}. \tag{29.24}$$

W ten sposób można otrzymać użyteczne wzory rekurencyjne dla sferycznych funkcji Bessel'a:

$$j_l(x) = x^l\left(-\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^l \frac{\sin x}{x}, \qquad y_l(x) = -x^l\left(-\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^l \frac{\cos x}{x}, \tag{29.25}$$

które noszą nazwę *związków Rayleigh'a.* Kilka pierwszych sferycznych funkcji Bessela ma postać

$$j_1(x) = \frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x}, \quad y_1(x) = -\frac{\cos x}{x^2} - \frac{\sin x}{x},$$
$$j_2(x) = \left(\frac{3}{x^2} - 1\right)\frac{\sin x}{x} - \frac{3}{x^2}\cos x, \quad y_2(x) = \left(-\frac{3}{x^2} + 1\right)\frac{\cos x}{x} - \frac{3}{x^2}\sin x.$$

Otrzymane w ten sposób funkcje $R_{kl} = r^l \chi_{kl}$ trzeba odpowiednio unormować:

$$R_{kl} = 2(-)^l \left(\frac{r}{k}\right)^l \left(\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\right)^l \frac{\sin kr}{r}$$
$$= 2kj_l(kr) = 2\sqrt{\frac{\pi}{2kr}} J_{l+1/2}(kr). \tag{29.26}$$

Bardzo użyteczna jest znajomość rozwiązań R_{kl} dla dużych r. Zauważmy, że różniczkowanie $1/r$ daje człony niewiodące, zaś różniczkowanie sinusa daje

$$-\frac{d}{dr}\sin kr = -k\cos kr = k\sin\left(kr - \frac{\pi}{2}\right). \tag{29.27}$$

Stąd już łatwo pokazać

$$R_{kl} \approx \frac{2}{r}\sin\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right). \tag{29.28}$$

Dla funkcji Bessel'a oznacza to, że dla dużych x

$$j_l(x) \sim \frac{\sin(x - l\pi/2)}{x}, \qquad y_l(x) \sim -\frac{\cos(x - l\pi/2)}{x}. \tag{29.29}$$

W ogólnym przypadku z potencjałem $V \neq 0$ dla dużych r odtwarzamy równanie swobodne, ale funkcja R_{kl} dla małych r będzie istotnie różna od funkcji swobodnej. Wówczas forma asymptotyczna ma postać

$$R_{kl} \approx \frac{2}{r}\sin\left(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l(k)\right) \tag{29.30}$$

gdzie funkcje $\delta_l(k)$ nosi nazwę przsunięcia fazowego.

Ten ostatni wzór łatwo zrozumieć rozpatrując rozpraszanie na nieskończenie sztywnej kuli o promieniu a:

$$V(r) = \begin{cases} \infty & \text{dla} \quad r < a \\ 0 & \text{dla} \quad r \geq a \end{cases}. \tag{29.31}$$

Rozpatrzmy $l = 0$. Wówczas dokładne rozwiązanie spełniające warunek brzegowy w $r = a$

$$R_{k0}(a) = 0 \tag{29.32}$$

ma postać

$$R_{k0} = 2\frac{\sin k(r-a)}{r} = 2\frac{\sin(kr - ka)}{r}. \tag{29.33}$$

Czyli

$$\delta_0(k) = -ka. \tag{29.34}$$

Dla dowolnej funkcji parcjalnej zapisujemy

$$R_{kl}(r) = A_l j_l(kr) + B_l y_l(kr). \tag{29.35}$$

Z równania (29.32) wynika

$$\frac{B_l}{A_l} = -\frac{j_l(ka)}{y_l(ka)}. \tag{29.36}$$

Asymptotycznie dla dużych r funkcja (29.35) zgodnie ze wzorami (29.29) przyjmuje postać

$$\begin{aligned} R_{kl}(r) &\sim \frac{1}{kr}\left[A_l \sin(kr - l\pi/2) - B_l \cos(kr - l\pi/2)\right] \\ &= \frac{\sqrt{A_l^2 + B_l^2}}{kr}\left[\frac{A_l}{\sqrt{A_l^2+B_l^2}}\sin(kr - l\pi/2) - \frac{B_l}{\sqrt{A_l^2+B_l^2}}\cos(kr - l\pi/2)\right]. \end{aligned} \tag{29.37}$$

Możemy zapisać

$$\frac{A_l}{\sqrt{A_l^2+B_l^2}} = \cos\delta_l, \; -\frac{B_l}{\sqrt{A_l^2+B_l^2}} = \sin\delta_l. \tag{29.38}$$

Rzeczywiście

$$\sin^2\delta_l + \cos^2\delta_l = 1 \tag{29.39}$$

i

$$\frac{-B_l}{A_l} = \tan\delta_l(k) \qquad \text{czyli} \qquad \delta_l(k) = \arctan\frac{j_l(ka)}{y_l(ka)}. \tag{29.40}$$

Wówczas dostajemy

$$\begin{aligned} R_{kl}(r) &\sim \frac{\sqrt{A_l^2+B_l^2}}{kr}\left[\cos\delta_l \sin(kr - l\pi/2) + \sin\delta_l \cos(kr - l\pi/2)\right] \\ &= \frac{\sqrt{A_l^2+B_l^2}}{kr}\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l(k)\right). \end{aligned} \tag{29.41}$$

Dla $l = 0$ mamy

$$\delta_0(k) = \arctan\left(\frac{\sin(ka)}{-\cos(ka)}\right) = -ka \tag{29.42}$$

zgodnie ze wzorem (29.34).

Warto zastanowić się nad rozpraszaniem przy małych energiach $k \to 0$. W tym celu skorzystamy ze znanych wzorów na zachowanie sferycznych funkcji Bessel'a w zerze:

$$j_l(x) \sim \frac{x^l}{(2l+1)!!}, \quad y_l(x) \sim -\frac{(2l-1)!!}{x^{l+1}}, \tag{29.43}$$

gdzie

$$(2l+1)!! = 1 \cdot 3 \cdot 5 \cdot \ldots \cdot (2l+1). \tag{29.44}$$

Zatem dla $k \to 0$

$$\tan\delta_l(k) \sim -(ka)^{2l+1} \tag{29.45}$$

co oznacza, że $\delta_l(k \to 0)$ jest małe i możemy także rozwinąć tangens otrzymując ostatecznie

$$\delta_l(k) \sim -(ka)^{2l+1}. \tag{29.46}$$

Wynik ten łatwo zinterpretować jako „wypychanie” funkcji falowej ze środka kuli. Zatem dla potencjałów odpychających w przyjętej przez nas konwencji przesunięcia falowe są *ujemne*. Stwierdzenie to jest oczywiście prawdziwe tylko dla małych wartości δ_l, gdyż przesunięcia fazowe są określone z doładnością do π. Proporcjonalność ta jest prawdziwa dla każdego realistycznego potencjału, przy czym a ma sens zasięgu potencjału. Dla potencjałów odpychających (bariera) znak jest ujemny, dla przyciągających dodatni.

29.3 Fale parcjalne

Rozwiązanie równania Schrödingera (29.9), opisujące rozparaszanie cząstki padającej na sferyczny potencjał wzdłuż osi z powinno mieć symetrię cylindryczną. Każde takie rozwiązanie można rozłożyć na funkcje kuliste o różnych l i $m = 0$. Ten ostatni warunek wynika z faktu, że nie może być zależności od kąta φ. Ponieważ takie funkcje kuliste są po prostu wielomianami Legendre'a mamy

$$A_{fi} = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)a_l(k)P_l(\cos\theta). \tag{29.47}$$

Współczyniki $a_l(k)$ nazywamy amplitudami l-tej fali parcjalnej. Musimy je dobrać tak, aby na dużych odległościach spełnić asymptotykę

$$\psi = e^{ikz} + A_{fi}\frac{e^{ikr}}{r}. \tag{29.48}$$

Pokażemy najpierw, że swobodna fala płaska ma rozwinięcie

$$u_i(\vec{r}) = e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l j_l(kr)P_l(\cos\theta) \tag{29.49}$$

Wzór (29.49) można udowodnić korzystając z tożsamości

$$j_l(kr) = \frac{1}{2i^l}\int_{-1}^{1} d\cos\theta\, P_l(\cos\theta)e^{ik\cos\theta} \tag{29.50}$$

i warunku unormowania wielomianów Legendre'a

$$\int_{-1}^{1} d\cos\theta\, P_l(\cos\theta)P_{l'}(\cos\theta) = \frac{2}{2l+1}\delta_{ll'}. \tag{29.51}$$

Wyznaczymy teraz współczynniki $a_l(k)$ dla niezerowego potencjału. Na dużych odległościach

$$\begin{aligned} j_l(kr) &= \frac{1}{2k}R_{kl}(r) \sim \frac{1}{kr}\sin\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right) \\ &= \frac{1}{2ik}\left[\frac{e^{i(kr-\pi l/2)}}{r} - \frac{e^{-i(kr-\pi l/2)}}{r}\right] \\ &= \frac{1}{2ik}e^{-i\pi l/2}\left[\frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{-i(kr-\pi l)}}{r}\right]. \end{aligned} \tag{29.52}$$

Zauważmy, że

$$e^{-i\pi l/2} = (-i)^l$$

i stąd

$$u_i(\vec{r}) = e^{ikz} = \frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\left[\frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{-i(kr-\pi l)}}{r}\right]P_l(\cos\theta). \tag{29.53}$$

Zatem dla każdej fali parcjalnej l mamy falę wychodzącą i wchodzącą o takich samych amplitudach, ale różnych fazach.

Z kolei dla całej funkcji ψ (29.48) możemy napisać analogiczne rozwinięcie asymptotyczne

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)A_l(k)\left[\frac{e^{i(kr+\delta_l(k))}}{r} - \frac{e^{-i(kr-\pi l+\delta_l(k))}}{r}\right]P_l(\cos\theta), \tag{29.54}$$

gdzie $A_l(k)$ jest pewną stałą. Ponieważ potencjał $V(r)$ modyfikuje *tylko falę wychodzącą*, to fala wchodząca we wzorze (29.54) i we wzorze (29.53) muszą mieć taki sam współczynnik. Stąd

$$A_l(k) = e^{i\delta_l(k)} \tag{29.55}$$

i dalej

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}) &= \frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\left[\frac{e^{i(kr+2\delta_l(k))}}{r} - \frac{e^{-i(kr-\pi l)}}{r}\right]P_l(\cos\theta) \\ &= \frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\left[\frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{-i(kr-\pi l)}}{r}\right]P_l(\cos\theta) \\ &+ \frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\left[\frac{e^{i(kr-\pi l+2\delta_l(k))}}{r} - \frac{e^{ikr}}{r}\right]P_l(\cos\theta). \end{aligned}$$

Czyli

$$\psi(\vec{r}) = e^{ikz} + \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\frac{e^{2i\delta_l(k)}-1}{2ik}P_l(\cos\theta)\,\frac{e^{ikr}}{r} \tag{29.56}$$

i stąd:

$$a_l = \frac{e^{2i\delta_l(k)}-1}{2ik} = e^{i\delta_l(k)}\frac{\sin\delta_l(k)}{k} \tag{29.57}$$

co daje

$$A_{fi} = \frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)e^{i\delta_l(k)}\sin\delta_l(k)P_l(\cos\theta). \tag{29.58}$$

Warto wprowadzić funkcję S_l zdefiniowaną jako

$$S_l(k) = e^{2i\delta_l(k)}. \tag{29.59}$$

Podstawiając ten ostatni wzór na amplitudę rosproszenia i wykonując całkę po kątach przy pomocy wzoru (29.51) otrzymujemy wzór na całkowity przekrój czynny

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l(k). \tag{29.60}$$

Na koniec warto zauważyć, że czynnik występujący w amplitudzie A_{fi}

$$\begin{aligned}\frac{1}{i}\left(S_l-1\right) &= \frac{e^{2i\delta_l(k)}-1}{i} = \frac{1}{i}(\cos 2\delta_l + i\sin 2\delta_l - 1)\\ &= \sin 2\delta_l - i\left(\cos^2\delta_l - \sin^2\delta_l - 1\right)\\ &= \sin 2\delta_l + 2i\sin^2\delta_l.\end{aligned} \tag{29.61}$$

Jeżeli przypomnimy sobie, że $P_l(1) = 1$, to widzimy, że

$$\operatorname{Im} A_{fi}(\theta = 0) = \frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l. \tag{29.62}$$

A stąd już trywialnie wynika *twierdzenie optyczne:*

$$\sigma = \frac{4\pi}{k}\operatorname{Im} A_{fi}(\theta = 0). \tag{29.63}$$

Zauważmy, że dla małych k dla rozpraszania na nieskończonej kuli mamy ($\delta_l(k) \sim -(ka)^{2l+1}$)

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l(k) \simeq \frac{4\pi}{k^2}\delta_0^2(k) \simeq 4\pi a^2. \tag{29.64}$$

Zwróćmy uwagę, że klasycznie spodziewalibyśmy się, że $\sigma \simeq \pi a^2$ czyli powierzchni widzianej przez strumień padających cząstek. Rozbieżność ta jest wynikiem czysto kwantowym. Podobnie, klasycznie spodziewalibyśmy się, że za kulą dla $\theta = 0$ różniczkowy przekrój czynny jest zero, gdy tymczasem kwantowo jest on niezerowy.

29.4 Rozpraszanie na barierze lub skończonej studni

Rozważmy rozpraszanie na potencjale

$$V = \begin{cases} \pm V_0 & \text{dla} \quad 0 \le r \le a \\ 0 & \text{dla} \quad a < r \end{cases},$$

gdzie $V_0 > 0$ jest miarą wysokości (głebokości potencjału), zaś a jego zasięgiem. Aby ułatwić sobie dyskusję, rozważymy rozpraszanie przy małych energiach, gdy $k \to 0$, tak że dominujący wkład do przwkroju czynnego wnosi fala s. Na zewnątrz studni funkcja $u_k(r) = rR_{k0}(r)$ spełnia znane nam równanie (29.13)

$$\frac{d^2}{dr^2}u_k + k^2 u_k = 0. \tag{29.65}$$

Rozwiązanie tego równania zapiszmy jako

$$u_{\text{out}}(r) = A\sin(kr + \delta_0) \tag{29.66}$$

Wewnątrz bariery (studni) mamy to samo równanie z

$$k \to k' = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E \mp V_0)}. \tag{29.67}$$

Rozwiązaniem spełniającym warunek brzegowy w $r = 0$ jest

$$u_{\text{in}}(r) = \sin(k'r)$$

ze stała normalizacyjną równą 1. Aby otrzymać pełne rozwiązanie musimi w $r = a$ zszyć funkcje u_{out} i u_{in} oraz ich pochodne, a następnie dobrać stała normalizacyjną pełnego rozwiązania. Dwa warunki

$$u_{\text{out}}(a) = u_{\text{in}}(a), \quad u'_{\text{out}}(a) = u'_{\text{in}}(a) \tag{29.68}$$

pozwalają wyznaczyć A i δ_0:

$$\begin{aligned} A\sin(k'a) &= \sin(ka + \delta_0(k)), \\ Ak'\cos(k'a) &= k\cos(ka + \delta_0(k)). \end{aligned} \tag{29.69}$$

Stąd dostajemy

$$\delta_0(k) = \arctan\left(\frac{k}{k'}\tan(k'a)\right) - ka \tag{29.70}$$

Zauważmy, że dla bariery

$$k' < k. \tag{29.71}$$

Pierwsze zero funkcji u_{in} występuje dla

$$r_0 = \frac{\pi}{k'} > \tilde{r}_0 \tag{29.72}$$

gdzie $\tilde{r}_0$ jest pierwszym zerem rozwiązania swobodnego. Oznacza to, że krzywizna funkcji u_{in} jest mniejsza niż krzywizna rozwiązania swobodnego. Dla studni potencjału, odwrotnie

$$r_0 = \frac{\pi}{k'} < \tilde{r}_0 \tag{29.73}$$

krzywizna jest większa.

Widzimy, że w przypadku rozpraszania na sferycznej studni, można dobrać tak jej głębokość i zasięg, że $\delta_0 = \pi$ i przekrój czynny zniknie. Zjawisko to nazywa się efektem Ramsauera-Townsenda i jest obserwowalne doświadczalnie.

29.5 Stany związane a bieguny $S_l(k)$

Przypomnijmy sobie wyprowadzony już uprzednio wzór na asymptotyczną poztać równania Schrödingera

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\left[\frac{e^{i(kr+2\delta_l(k))}}{r} - \frac{e^{-i(kr-\pi l)}}{r}\right] P_l(\cos\theta).$$

Widzimy, że dla $l = 0$ funkcja ta jest proporcjonalna do

$$S_0(k)\frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{-ikr}}{r}, \tag{29.74}$$

gdzie

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E}. \tag{29.75}$$

Przypomnijmy, że e^{ikr} ma sens fali wychodzącej a e^{-ikr}fali padającej. Porównajmy tę funkcję z asymptotyczną postacią funkcji falowej stanu związanego

$$\frac{e^{-\varkappa r}}{r}, \tag{29.76}$$

gdzie

$$\varkappa = \sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2}E}. \tag{29.77}$$

Dla stanów związanych $E < 0$ i

$$k \to i\varkappa \quad \text{czyli} \quad \frac{e^{ikr}}{r} \to \frac{e^{-\varkappa r}}{r}. \tag{29.78}$$

Istotną różnicą między funkcjami (29.76) i (29.74) jest to, że w przypadku stanu związanego nie mamy do czynienia z analogiem fali padającej. Oznacza to, że przeprowadzając *przdłużenie analityczne* (29.78), stosunek współczynników fali wychodzącej do fali padającej dany przez $S_0(k)$ musi być nieskończony. Tylko wówczas czynnik $e^{+\varkappa r}$nie pojawi się w asymptotyce funkcji falowej stanu związanego. Jednakże stany związane mogą istnieć tylko dla skwantowanych wartości $\varkappa_n$, czyli $S_0(k)$ powinno mieć bieguny dla dyskretnych wartości urojonego $k_n = i\varkappa_n$. Można pokazać, że są to bieguny proste.

29.6 Rezonanse

Zgodnie ze wzorem (29.46) spodziewamy się, że także dla sferycznej studni przekrój czynny będzie znikał w granicy małych energii $k \to 0$. Tak jest rzeczywiście, za wyjątkiem przypadku, gdy studnia ma takie parametry, że istnieje w niej stan związany o energii równej zero. Zilustrujmy to przykładem fali parcjalnej o $l = 0$, dla której mamy

$$\delta_0(k) = \arctan\left(\frac{k}{k'}\tan(k'a)\right) - ka \simeq \arctan\left(\frac{k}{k'}\tan(k'a)\right)$$

gdy $ka \to 0$. Pamiętając, że

$$\sin(\arctan(x)) = \frac{x}{\sqrt{1+x^2}} \tag{29.79}$$

mamy

$$\sin\delta_0(k) = \frac{ka\frac{\tan k'a}{k'a}}{\sqrt{1+(ka)^2\left(\frac{\tan k'a}{k'a}\right)^2}} \tag{29.80}$$

Wówczas

$$k' = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E+V_0)} \sim k_0 = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}. \tag{29.81}$$

Jeżeli $\tan(k_0 a)$ jest skończony to

$$\frac{ka\frac{\tan k'a}{k'a}}{\sqrt{1+(ka)^2\left(\frac{\tan k'a}{k'a}\right)^2}} \simeq ka\frac{\tan k'a}{k'a} \tag{29.82}$$

i w konsekwencji przekrój czynny dąży do stałej:

$$\sigma_0 = \frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_0(k) = 4\pi a^2\left(\frac{\tan k_0 a}{k_0 a}\right)^2. \tag{29.83}$$

Jednakże dal pewnych parametrów studni $\tan k_0 a$ może być nieskończony:

$$\tan k_0 a = \infty \quad \text{gdy} \quad k_0 a = \left(n+\frac{1}{2}\right)\pi. \tag{29.84}$$

Jest to warunek na stany związane w sferycznej studni potencjału dla zerowej energii. Rzeczywiście, dla ujemnej energii $-E$

$$k' = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0-E)} \quad \text{oraz} \quad \kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E} \tag{29.85}$$

i rozwiązania mają postać

$$u_{\mathrm{in}} = A\sin(k'r), \quad u_{\mathrm{out}} = e^{-\kappa r}. \tag{29.86}$$

Warunki zszycia

$$\begin{aligned} A\sin(k'a) &= e^{-\kappa a}, \\ Ak'\cos(k'a) &= -\kappa e^{-\kappa a}. \end{aligned} \tag{29.87}$$

Dzieląc stronami otrzymujemy warunek na stany związane w studni

$$\frac{\tan(k'a)}{k'a} = -\frac{1}{\kappa a}. \tag{29.88}$$

Gdy energia zmierza do zera od dołu $k' \to k_0$ oraz $\kappa \to 0$ i tangens wybucha.

Zbadajmy granicę $k \to 0$:

$$k' = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)} = \sqrt{k_0^2 - k^2} = k_0 - \frac{1}{2}\frac{k^2}{k_0}. \tag{29.89}$$

Wówczas

$$\tan k'a \simeq \tan\left(k_0 a - \frac{k^2 a}{2k_0}\right) = \tan\left[\left(n + \frac{1}{2}\right)\pi - \frac{k^2 a}{2k_0}\right]. \tag{29.90}$$

Musimy zatem rozwinąć tangens wokół punktu $n + \pi/2$. Mamy

$$\sin\left(n + \frac{1}{2}\right)\pi = (-)^n. \tag{29.91}$$

Dalej

$$\cos\left(\frac{\pi}{2} + n\pi - \frac{k^2 a}{2k_0}\right) = -\sin\left(n\pi - \frac{k^2 a}{2k_0}\right) = (-)^n \sin\left(\frac{k^2 a}{2k_0}\right) \simeq (-)^n \frac{k^2 a}{2k_0}. \tag{29.92}$$

Stąd mamy

$$ka\frac{\tan k'a}{k'a} \simeq \frac{k}{k_0}\frac{1}{\frac{k^2 a}{2k_0}} = \frac{2}{ka} \to \infty. \tag{29.93}$$

Wówczas

$$\sin^2\delta_0(k) \simeq \frac{ka\frac{\tan k'a}{k'a}}{\sqrt{1 + (ka)^2\left(\frac{\tan k'a}{k'a}\right)^2}} \to 1, \tag{29.94}$$

czyli osiąga maksymalną możliwą wartość.

Oznacza to, że w granicy rozpraszania przy zerowej energii przkrój czynny staje się nieskończony, jeśli studnia ma parametry, które dopuszczają stan związany o zerowej energii. W tej granicy:

$$\sigma_0 = \frac{4\pi}{k^2} \tag{29.95}$$

Dla wyższych fal parcjalnych możemy przyjąć, że w okolicy *rezonansu* (nie dla zerowej energii)

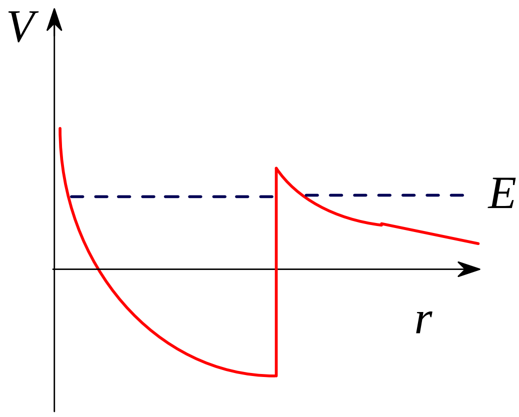
$$\delta_l(E) = \arctan\frac{\Gamma/2}{E_0 - E}. \tag{29.96}$$

Jest to wzór, który modeluje fakt, że

$$\tan\delta_l(E) \to \infty \text{ gdy } E \to E_0 \tag{29.97}$$

podobnie jak bylo to w przypadku $\delta_0(k)$. Wówczas

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2}(2l+1)\sin^2\delta_l(E) = \frac{4\pi}{k^2}(2l+1)\frac{\left(\frac{\Gamma/2}{E_0-E}\right)^2}{1 + \left(\frac{\Gamma/2}{E_0-E}\right)^2} = \frac{4\pi}{k^2}(2l+1)\frac{(\Gamma/2)^2}{(E_0-E)^2 + (\Gamma/2)^2}. \tag{29.98}$$



Rysunek 1: Przykład rezonansu.

Jest to krzywa Breita-Wignera. Taka zależność przesunięcia fazowego od energii daje się przetłumaczyć na zależność S_l od energii

$$S_l = e^{2i\delta_l} = \frac{e^{i\delta_l}}{e^{-i\delta_l}} = \frac{\cos\delta_l + i\sin\delta_l}{\cos\delta_l - i\sin\delta_l} = \frac{1 + i\tan\delta_l}{1 - i\tan\delta_l} = \frac{E - E_0 - i\Gamma/2}{E - E_0 + i\Gamma/2}. \tag{29.99}$$

Oznacza to że funkcja $S_l(E)$ ma bieguny pod osią rzeczywistą odpowiadającą rezonansom $E = E_0 - i\Gamma/2$.

Dla dodatnich wartości rzeczywistego k mamy do czynienia z obszarem fizycznym dla rozpraszania, gdzie $\delta_0(k)$ jest rzeczywiste. W granicy $k \to 0$ wzdłuż osi rzeczywistej $\delta_0 \to 0, \pm\pi, \ldots$. Tę własność można ściśle udowodnić w następujący sposób. Daleko od potencjału rozwiązanie równania (29.65)

$$u_k(r) \sim \sin(kr + \delta_0) = \sin\left(k\left(r + \frac{\delta_0}{k}\right)\right). \tag{29.100}$$

Z kolei równanie (29.65) dla $k = 0$ ma proste rozwiązanie

$$u_0(r) = \mathrm{const.}(r - a) \tag{29.101}$$

czyli linię prostą! Aby zobaczyć jak otrzymać z (29.100) linię prosta w granicy $k \to 0$ rozważmy stosunek

$$\frac{u_0'}{u_0} = \frac{1}{r - a} = \lim_{k\to 0} k\cot\left(k\left(r + \frac{\delta_0}{k}\right)\right). \tag{29.102}$$

Podstawiając $r = 0$ (nawet jeśli dla $r = 0$ nie jest to prawdziwa funkcja falowa) dostajemy

$$\lim_{k\to 0} k\cot\left(\delta_0(k)\right) = -\frac{1}{a}, \tag{29.103}$$

gdzie jawnie zaznaczyliśmy, że przesunięcie fazowe zależy od energii. Naturalnym rozwiązaniem tego równania

$$\lim_{k\to 0} \frac{\cos\left(\delta_0(k)\right)}{\frac{\sin(\delta_0(k))}{-ka}} = 1 \tag{29.104}$$

jest

$$\delta_0(k) = -ka \pm n\pi. \tag{29.105}$$

Podsumowując

$$\lim_{k\to 0} S_0(k) = \lim_{k\to 0} e^{i2\delta_0(k)} = 1. \tag{29.106}$$

Widzimy zatem, że $S_0(k)$ ma następujące własności:

1. bieguny w $k = i\varkappa_n$;
2. bieguny rezonansowe;

   Dodatkowo mamy następujące własności:
3. $|S_0(k)| = 1$ dla rzeczywistych $k > 0$ (unitarność);
4. $S_0(0) = 1$ (zachowanie progowe).

   Na ogół mamy też $S_0(\infty) = 1$.