

28 Rozpraszanie, przybliżenie Borna

28.1 Równanie Schrödingera

W trzech wymiarach spróbujemy skonstruować schemat kolejnych przybliżeń, który pozwoli znaleźć nam szukaną funkcję falową. Odpowiednio daleko od obszaru działania potencjału zarówno cząstka padająca (i) jak i rozproszona (f) będą opisane falami płaskimi:

$$u_i(\vec{r}) = e^{i\vec{k}_i\vec{r}}, \quad u_f(\vec{r}) = e^{i\vec{k}_f\vec{r}}. \quad (28.1)$$

Warto zauważyć, że o ile kierunek pędu cząstki padającej możemy wybrać np. jako kierunek osi z , to kierunek cząstki rozproszonej, czyli \vec{k}_f , może być dowolny. Gęstość strumienia cząstek padających jest w przypadku trójwymiarowym wektorem i wynosi

$$\vec{S}_i = -\frac{i\hbar}{2m} \left(u_i^*(x) \vec{\nabla} u_i(x) - u_i(x) \vec{\nabla} u_i^*(x) \right) = \frac{\hbar}{m} \vec{k}_i. \quad (28.2)$$

Zauważmy, że za funkcję u_i przyjęliśmy *nieznormalizowaną* falę płaską (28.1). Składowe wektora \vec{S}_i mają podobnie jak w przypadku jednowymiarowym wymiar prędkości, czyli liczby padających cząstek na jednostkę czasu.

Równanie Schrödingera

$$(\nabla^2 + k^2) \psi(\vec{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} V(\vec{r}) \psi(\vec{r}) \quad (28.3)$$

zamienimy w równanie całkowe i będziemy go rozwiązywać iteracyjnie. Warto tu zauważyć, że (28.3) można potraktować jako niejednorodne równanie różniczkowe drugiego rzędu, gdzie członem źródłowym jest

$$j(\vec{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} V(\vec{r}) \psi(\vec{r}). \quad (28.4)$$

Takie potraktowanie równania (28.3) jest w pewnym sensie niestandardowe, gdyż na ogół źródłem jest znana, zadana funkcja, a nie funkcja zawierająca funkcję poszukiwaną (w tym wypadku ψ).

28.2 Funkcja Greena

Rozwiązanie niejednorodnego równania typu

$$(\nabla_r^2 + k^2) \psi(\vec{r}) = j(\vec{r}) \quad (28.5)$$

znajdujemy konstruując funkcję Greena zdefiniowaną jako

$$(\nabla_r^2 + k^2) G(\vec{r}, \vec{r}') = \delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (28.6)$$

Wówczas

$$\psi(\vec{r}) = u_i(\vec{r}) + \int d^3r' G(\vec{r}, \vec{r}') j(\vec{r}'), \quad (28.7)$$

gdzie człon jednorodny został tak dobrany, by w granicy $j = 0$ (brak potencjału), ψ_i redukowało się do funkcji falowej cząstki padającej.

Aby znaleźć funkcję Greena zapiszmy funkcję δ oraz $G(\vec{r} - \vec{r}')$ (f. Greena zawsze zależy od różnicy argumentów) w postaci transformaty Fouriera:

$$\begin{aligned}\delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{r}') &= \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} e^{i\vec{q}(\vec{r} - \vec{r}')}, \\ G(\vec{r} - \vec{r}') &= \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} e^{i\vec{q}(\vec{r} - \vec{r}')} \tilde{G}(\vec{q}),\end{aligned}\quad (28.8)$$

Podstawiając (28.8) równania do obu stron równania (28.6) otrzymujemy

$$\tilde{G}(\vec{q}) = \frac{1}{k^2 - q^2}. \quad (28.9)$$

Widzimy zatem, że po pierwsze funkcja Greena \tilde{G} nie zależy od kierunku, a po drugie, że możemy mieć kłopoty z drugą transformatą Fouriera (28.8), żeby wyliczyć G . Rzeczywiście

$$G(\vec{x}) = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} e^{i\vec{q}\vec{x}} \frac{1}{k^2 - q^2} \quad (28.10)$$

nie jest dobrze określona dla $k = q$. Zanim zajmiemy się tą trudnością, wykonajmy całkę po kątach:

$$\begin{aligned}G(\vec{x}) &= \int_0^\infty \frac{q^2 dq}{(2\pi)^3} \frac{1}{k^2 - q^2} \int_0^\pi d\varphi \int_{-1}^1 d \cos \theta e^{iqx \cos \theta} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{1}{ix} \int_0^\infty \frac{q dq}{k^2 - q^2} (e^{iqx} - e^{-iqx}).\end{aligned}\quad (28.11)$$

Jeśli w drugiej całce zamienić $q \rightarrow -q$ to otrzymamy

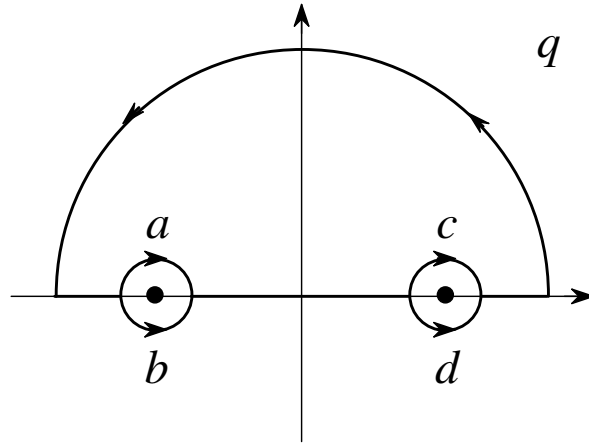
$$G(x) = \frac{i}{(2\pi)^2 x} \int_{-\infty}^\infty \frac{q dq}{(q - k)(q + k)} e^{iqx}, \quad (28.12)$$

gdzie opuściliśmy znak wektora nad x , gdyż jak widać, funkcja $G(x)$ zależy tylko od modułu $x = |\vec{x}|$.

Całkę po osi rzeczywistej możemy wykonać domykając kontur całkowania w górnej półpłaszczyźnie zespolonego q , gdyż $x > 0$. W tym celu, trzeba dokonać wyboru, jak obejść bieguny w punktach $q = \pm k$. Po pierwsze, jeżeli oba bieguny obejdziemy górą to dostaniemy w wyniku zero. A zatem zostają trzy możliwości

- albo $q = -k - i\varepsilon$ (a) i $q = k + i\varepsilon$ (d), wówczas tylko ten drugi biegun daje przyczynek

$$G_+(x) = -\frac{1}{4\pi x} e^{ikx}, \quad (28.13)$$



Rysunek 1: Osobliwości w płaszczyźnie zespolonego q .

- względnie $q = -k + i\varepsilon$ (b) i $q = k - i\varepsilon$ (c) i wtedy

$$G_-(x) = -\frac{1}{4\pi x} e^{-ikx}, \quad (28.14)$$

- oraz kiedy oba bieguny obejdziemy dołem (b, d), wówczas

$$G(x) = \frac{1}{2}G_+(x) + \frac{1}{2}G_-(x). \quad (28.15)$$

Wybraliśmy tu czynnik $1/2$ aby spełnione było równanie (28.6).

O tym którą możliwość wybrać, zadecyduje asymptotyka otrzymanych rozwiązań. Zauważmy, że dla dużych r mamy

$$\begin{aligned} x &= |\vec{r} - \vec{r}'| = \sqrt{r^2 + r'^2 - 2rr' \cos \theta} \\ &\simeq r \sqrt{1 - 2\frac{r'}{r} \cos \theta} \simeq r - r' \cos \theta \end{aligned} \quad (28.16)$$

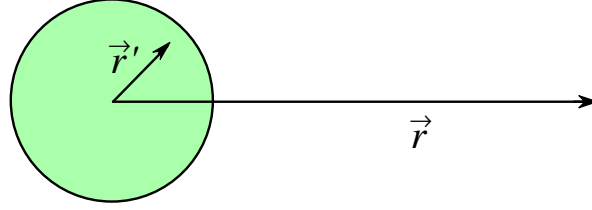
i dalej

$$kx \simeq kr - \vec{k}_f \vec{r}', \quad (28.17)$$

gdzie

$$\vec{k}_f = k \frac{\vec{r}}{r} \quad (28.18)$$

jest wektorem skierowanym wzdłuż promienia \vec{r} o module równym k (zachowanie energii!). Zatem, jeśli we wzorze (28.7) użyć G_+ to część niejednorodna funkcji ψ zachowuje się jak e^{ikr} , a więc jak *wychodząca* od centrum fala kulista. Z kolei G_- opisuje *wchodzącą* do centrum falę kulistą. W celu opisanego rozproszenia za G musimy przyjąć G_+ .



Rysunek 2: Przybliżenie dużych odległości.

28.3 Amplituda rozpraszania

Podstawiając do (28.7) G_+ i j dane równaniem (28.4) otrzymujemy:

$$\psi(\vec{r}) = u_i(\vec{r}) - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} V(\vec{r}') \psi(\vec{r}'). \quad (28.19)$$

Równanie to będziemy rozwiązywać perturbacyjnie zakładając, że V jest „małe”. Najlepiej jest to zrobić wprowadzając parametr λ

$$V \rightarrow \lambda V \quad (28.20)$$

i rozwijając

$$\psi = \psi^{(0)} + \lambda\psi^{(1)} + \lambda^2\psi^{(2)} + \dots \quad (28.21)$$

Otrzymujemy wówczas rekurencję

$$\begin{aligned} \psi^{(0)}(\vec{r}) &= u_i(\vec{r}), \\ \psi^{(n)}(\vec{r}) &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} V(\vec{r}') \psi^{(n-1)}(\vec{r}') \end{aligned} \quad (28.22)$$

co daje

$$\begin{aligned} \psi^{(1)}(\vec{r}) &= -\frac{m}{\pi\hbar^2} \int d^3r' \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} V(\vec{r}') u_i(\vec{r}') \\ \psi^{(2)}(\vec{r}) &= \left(\frac{m}{\pi\hbar^2}\right)^2 \int d^3r' \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} V(\vec{r}') \int d^3r'' \frac{e^{ik|\vec{r}'-\vec{r}''|}}{|\vec{r}'-\vec{r}''|} V(\vec{r}'') u_i(\vec{r}'') \end{aligned} \quad (28.23)$$

i tak dalej. Zauważmy, że dla $r \gg r'$ i dla zlokalizowanych potencjałów możemy użyć przybliżenia (28.16) i (28.17) pod pierwszą całką po dr' :

$$\begin{aligned} \psi^{(1)}(\vec{r}) &= -\frac{m}{\pi\hbar^2} \int d^3r' e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{r}'} V(\vec{r}') u_i(\vec{r}') \times \frac{e^{ikr}}{r} \\ \psi^{(2)}(\vec{r}) &= \left(\frac{m}{\pi\hbar^2}\right)^2 \int d^3r' e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{r}'} V(\vec{r}') \int d^3r'' \frac{e^{ik|\vec{r}'-\vec{r}''|}}{|\vec{r}'-\vec{r}''|} V(\vec{r}'') u_i(\vec{r}'') \times \frac{e^{ikr}}{r}. \end{aligned} \quad (28.24)$$

Wzór (28.24) ma bardzo prostą interpretację fizyczną: kolejne przybliżenia odpowiadają kolejnym rozproszeniom na potencjale V przeplatanym propagacją swobodną opisaną funkcją Greena (28.13).

Widać zatem, że ogólna postać funkcji falowej daje się zapisać jako

$$\psi(\vec{r}) = u_i(\vec{r}) + A_{fi} \times \frac{e^{ikr}}{r}, \quad (28.25)$$

gdzie

$$A_{fi} = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' u_f^*(\vec{r}') V(\vec{r}') \psi(\vec{r}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \langle u_f | V | \psi \rangle \quad (28.26)$$

jest *amplitudą rozpraszania* od stanu i (zauważmy, że funkcja ψ w przypadku braku oddziaływania redukuje się do funkcji u_i) do stanu f . Amplituda ma wymiar długości i nie zależy od r a tylko od kątów (poprzez \vec{k}_f). Podstawiając za ψ_i kolejne przybliżenia (28.24) otrzymujemy kolejne przybliżenia dla amplitudy rozpraszania. W pierwszym rzędzie dostajemy tzw. *przybliżenie Borna*:

$$\begin{aligned} A_{fi} &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' u_f^*(\vec{r}') V(\vec{r}') u_i(\vec{r}') \\ &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' e^{-i(\vec{k}_f - \vec{k}_i) \cdot \vec{r}'} V(\vec{r}'). \end{aligned} \quad (28.27)$$

czyli transformatę Fouriera potencjału. Warto zauważyć, że tak zdefiniowana amplituda A_{fi} ma wymiar długości.

28.4 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}

$$\vec{S} = -\frac{i\hbar}{2m} \left(\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^* \right) \quad (28.28)$$

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

$$\psi(\vec{r}) = u_i(\vec{r}) + A_{fi} \times \frac{e^{ikr}}{r} \quad (28.29)$$

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

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

$$N_f = S_f^r r^2 d\Omega \quad (28.30)$$

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

$$S_f^r = -\frac{i\hbar}{2m} \left(\psi_f^* \frac{\partial \psi_f}{\partial r} - \psi_f \frac{\partial \psi_f^*}{\partial r} \right) = \frac{\hbar k}{mr^2} |A_{fi}|^2. \quad (28.31)$$

gdź funkcja falowa cząstek rozproszonych to

$$\psi_f = A_{fi} \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (28.32)$$

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

Całkowita liczba cząstek padających na jednostkę czasu dana jest wzorem:

$$N_i = |\vec{S}_i| = \frac{\hbar k_i}{m}. \quad (28.33)$$

Różniczkowy przekrój czynny definiujemy jako

$$d\sigma(\theta, \varphi) = \frac{N_f}{N_i} = \frac{S_f^r r^2 d\Omega}{|\vec{S}_i|} = \frac{k}{k_i} |A_{fi}|^2 d\Omega \quad (28.34)$$

przy czym dla rozpraszania elastycznego (z zachowaną energią) mamy

$$\frac{d\sigma(\theta, \varphi)}{d\Omega} = |A_{fi}(\theta, \varphi)|^2. \quad (28.35)$$

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 (28.34)