29 Rozpraszanie na potencjale sferycznie symetrycznym - fale kuliste

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

$$\frac{d^2}{dr^2} R_{kl} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} R_{kl} + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2m}{\hbar^2} V(r) \right) R_{kl} = 0, \tag{29.1}$$

a pełna funkcja falowa dana jest wzorem

$$\psi_{klm}(\vec{r}) = R_{kl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi). \tag{29.2}$$

Na funkcje te narzucimy warunek unormowania

$$\int d^3 r \, \psi^*_{k'l'm'} \psi_{klm} = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \, 2\pi \delta(k - k'), \tag{29.3}$$

co tłumaczy się na funkcje radialne

$$\int\limits_0^\infty dr \, r^2 R_{k'l} R_{kl} = 2\pi \delta(k - k') \tag{29.4}$$

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

Rozwiążmy równanie (29.1) 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 (29.1) można przepisać

$$\frac{d^2}{dr^2}(r R_{k0}) + k^2 (r R_{k0}) = 0. \tag{29.5}$$

Równanie to ma dwa rozwiązania:

$$rR = \sin kr \qquad \text{lub} \qquad rR = \cos kr. \tag{29.6}$$

Zatem rozwiązanie skończone w zerze i unormowane ma postać

$$R_{k0} = 2 \frac{\sin kr}{r}. \tag{29.7}$$

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

$$j_0(x) = \frac{\sin x}{x} \tag{29.8}$$

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

$$y_0(x) = -\frac{\cos x}{x} \tag{29.9}$$

Dla $l \neq 0$ podstawmy

$$R_{kl} = r^l \chi_{kl}. \tag{29.10}$$

Wówczas

$$\chi''_{kl} + \frac{2(l+1)}{r}\chi'_{kl} + k^2\chi_{kl} = 0. \tag{29.11}$$

Zróżniczkujmy równanie (29.11) po r:

$$\chi'''_{kl} + \frac{2(l+1)}{r}\chi''_{kl} + \left(k^2 - \frac{2(l+1)}{r^2}\right)\chi'_{kl} = 0. \tag{29.12}$$

Dokonajmy teraz podstawienia

$$\chi'_{kl} = r f_{kl} \tag{29.13}$$

i podstawmy do równania (29.12):

$$f''_{kl} + \frac{2(l+2)}{r} f'_{kl} + k^2 f_{kl} = 0. \tag{29.14}$$

Zauważmy, że jest to równanie identyczne z równaniem (29.11) dla $l \to l+1$. A zatem

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

czyli

$$\chi_{k\,l+1} = \frac{1}{r}\chi'_{kl}. \tag{29.15}$$

Stąd rekurencja

$$\chi_{kl} = \left(\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\right)^l \chi_{k0}. \tag{29.16}$$

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

$$j_l(x) = x^l\left(-\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^l \frac{\sin x}{x}, \qquad y_l(x) = -x^l\left(-\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^l \frac{\cos x}{x}, \tag{29.17}$$

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

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

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

$$\begin{aligned} R_{kl} &= 2(-)^l \left(\frac{r}{k}\right)^l \left(\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\right)^l \frac{\sin kr}{r} \\ &= 2k j_l(kr) = 2\sqrt{\frac{\pi}{2kr}} J_{l+1/2}(kr). \end{aligned} \tag{29.18}$$

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

$$-\frac{d}{dr}\sin kr = -k\cos kr = k\sin\left(kr - \frac{\pi}{2}\right). \tag{29.19}$$

Stąd już łatwo pokazać

$$R_{kl} \approx \frac{2}{r}\sin\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right). \tag{29.20}$$

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

$$j_l(x) \sim \frac{\sin(x - l\pi/2)}{x}, \qquad y_l(x) \sim -\frac{\cos(x - l\pi/2)}{x}. \tag{29.21}$$

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

$$R_{kl} \approx \frac{2}{r}\sin\left(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l(k)\right) \tag{29.22}$$

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

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

$$V(r) = \begin{cases} \infty & \text{dla} \quad r < a \\ 0 & \text{dla} \quad r \geq a \end{cases}. \tag{29.23}$$

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

$$R_{k0}(a) = 0 \tag{29.24}$$

ma postać

$$R_{k0} = 2\frac{\sin k(r-a)}{r} = 2\frac{\sin(kr - ka)}{r}. \tag{29.25}$$

Czyli

$$\delta_0(k) = -ka. \tag{29.26}$$

Dla dowolnej funkcji parcjalnej zapisujemy

$$R_{kl}(r) = A_l j_l(kr) + B_l y_l(kr). \tag{29.27}$$

Z równania (29.24) wynika

$$\frac{B_l}{A_l} = -\frac{j_l(ka)}{y_l(ka)}. \tag{29.28}$$

Asymptotycznie dla dużych r funkcja (29.27) zgodnie ze wzorami (29.21) przyjmuje postać

$$\begin{aligned} R_{kl}(r) &\sim \frac{1}{kr}\left[A_l \sin(kr - l\pi/2) - B_l \cos(kr - l\pi/2)\right] \\ &= \frac{\sqrt{A_l^2 + B_l^2}}{kr}\left[\frac{A_l}{\sqrt{A_l^2 + B_l^2}} \sin(kr - l\pi/2) - \frac{B_l}{\sqrt{A_l^2 + B_l^2}} \cos(kr - l\pi/2)\right]. \end{aligned} \tag{29.29}$$

Możemy zapisać

$$\frac{A_l}{\sqrt{A_l^2 + B_l^2}} = \cos\delta_l, \; -\frac{B_l}{\sqrt{A_l^2 + B_l^2}} = \sin\delta_l. \tag{29.30}$$

Rzeczywiście

$$\sin^2\delta_l + \cos^2\delta_l = 1 \tag{29.31}$$

i

$$\frac{-B_l}{A_l} = \tan\delta_l(k) \qquad \text{czyli} \qquad \delta_l(k) = \arctan\frac{j_l(ka)}{y_l(ka)}. \tag{29.32}$$

Wówczas dostajemy

$$\begin{aligned} R_{kl}(r) &\sim \frac{\sqrt{A_l^2 + B_l^2}}{kr}\left[\cos\delta_l \sin(kr - l\pi/2) + \sin\delta_l \cos(kr - l\pi/2)\right] \\ &= \frac{\sqrt{A_l^2 + B_l^2}}{kr} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l(k)\right). \end{aligned} \tag{29.33}$$

Dla $l = 0$ mamy

$$\delta_0(k) = \arctan\left(\frac{\sin(ka)}{-\cos(ka)}\right) = -ka \tag{29.34}$$

zgodnie ze wzorem (29.26).

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:

$$j_l(x) \sim \frac{x^l}{(2l+1)!!}, \quad y_l(x) \sim -\frac{(2l-1)!!}{x^{l+1}}, \tag{29.35}$$

gdzie

$$(2l+1)!! = 1 \cdot 3 \cdot 5 \cdot \ldots \cdot (2l+1). \tag{29.36}$$

Zatem dla $k \to 0$

$$\tan\delta_l(k) \sim -(ka)^{2l+1} \tag{29.37}$$

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

$$\delta_l(k) \sim -(ka)^{2l+1}. \tag{29.38}$$

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 dokładnością 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.