30 Rozpraszanie, fale parcjalne, twierdzenie optyczne

30.1 Fale parcjalne

Rozwiązanie równania Schrödingera, 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

$$A_{fi} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) a_l(k) P_l(\cos\theta). \tag{30.1}$$

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

$$\psi = e^{ikz} + A_{fi} \frac{e^{ikr}}{r}. \tag{30.2}$$

Pokażemy najpierw, że swobodna fala płaska ma rozwinięcie

$$u_i(\vec{r}) = e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos\theta) \tag{30.3}$$

Wzór (30.3) można udowodnić korzystając z tożsamości

$$j_l(kr) = \frac{1}{2i^l} \int_{-1}^{1} d\cos\theta \, P_l(\cos\theta) e^{ikr\cos\theta} \tag{30.4}$$

i warunku unormowania wielomianów Legendre'a

$$\int_{-1}^{1} d\cos\theta \, P_l(\cos\theta) P_{l'}(\cos\theta) = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'}. \tag{30.5}$$

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

$$\begin{aligned} j_l(kr) &= \frac{1}{2k} R_{kl}(r) \sim \frac{1}{kr} \sin\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right) \\ &= \frac{1}{2ik} \left[\frac{e^{i(kr-\pi l/2)}}{r} - \frac{e^{-i(kr-\pi l/2)}}{r} \right] \\ &= \frac{1}{2ik} e^{-i\pi l/2} \left[\frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{-i(kr-\pi l)}}{r} \right]. \end{aligned} \tag{30.6}$$

Zauważmy, że

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

i stąd

$$u_i(\vec{r}) = e^{ikz} = \frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\left[\frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{-i(kr-\pi l)}}{r}\right]P_l(\cos\theta). \tag{30.7}$$

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

Z kolei dla całej funkcji ψ (30.2) możemy napisać analogiczne rozwinięcie asymptotyczne

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)A_l(k)\left[\frac{e^{i(kr+\delta_l(k))}}{r} - \frac{e^{-i(kr-\pi l+\delta_l(k))}}{r}\right]P_l(\cos\theta), \tag{30.8}$$

gdzie $A_l(k)$ jest pewną stałą. Ponieważ potencjał $V(r)$ modyfikuje *tylko falę wychodzącą*, to fala wchodząca we wzorze (30.8) i we wzorze (30.7) muszą mieć taki sam współczynnik. Stąd

$$A_l(k) = e^{i\delta_l(k)} \tag{30.9}$$

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

$$\psi(\vec{r}) = e^{ikz} + \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\frac{e^{2i\delta_l(k)}-1}{2ik}P_l(\cos\theta)\,\frac{e^{ikr}}{r} \tag{30.10}$$

i stąd:

$$a_l = \frac{e^{2i\delta_l(k)}-1}{2ik} = e^{i\delta_l(k)}\frac{\sin\delta_l(k)}{k} \tag{30.11}$$

co daje

$$A_{fi} = \frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)e^{i\delta_l(k)}\sin\delta_l(k)P_l(\cos\theta). \tag{30.12}$$

Warto wprowadzić funkcję S_l zdefiniowaną jako

$$S_l(k) = e^{2i\delta_l(k)}. \tag{30.13}$$

Podstawiając ten ostatni wzór na amplitudę rosproszenia i wykonując całkę po kątach przy pomocy wzoru (30.5) otrzymujemy wzór na całkowity przekrój czynny

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l(k). \tag{30.14}$$

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

$$\begin{aligned}\frac{1}{i}\left(S_l-1\right) = \frac{e^{2i\delta_l(k)}-1}{i} &= \frac{1}{i}(\cos 2\delta_l + i\sin 2\delta_l - 1)\\ &= \sin 2\delta_l - i\left(\cos^2\delta_l - \sin^2\delta_l - 1\right)\\ &= \sin 2\delta_l + 2i\sin^2\delta_l.\end{aligned} \tag{30.15}$$

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

$$\operatorname{Im} A_{fi}(\theta = 0) = \frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l. \tag{30.16}$$

A stąd już trywialnie wynika *twierdzenie optyczne:*

$$\sigma = \frac{4\pi}{k}\operatorname{Im} A_{fi}(\theta = 0). \tag{30.17}$$

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

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l(k) \simeq \frac{4\pi}{k^2}\delta_0^2(k) \simeq 4\pi a^2. \tag{30.18}$$

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.

30.2 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

$$S_0(k)\frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{-ikr}}{r}, \tag{30.19}$$

gdzie

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E}. \tag{30.20}$$

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

$$\frac{e^{-\varkappa r}}{r}, \tag{30.21}$$

gdzie

$$\varkappa = \sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2}E}. \tag{30.22}$$

Dla stanów związanych $E < 0$ i

$$k \to i\varkappa \quad \text{czyli} \quad \frac{e^{ikr}}{r} \to \frac{e^{-\varkappa r}}{r}. \tag{30.23}$$

Istotną różnicą między funkcjami (30.21) i (30.19) jest to, że w przypadku stanu związanego nie mamy do czynienia z analogiem fali padającej. Oznacza to, że przeprowadzając *przdłużenie analityczne* (30.23), 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.

Podsumowując

$$\lim_{k\to 0} S_0(k) = \lim_{k\to 0} e^{i2\delta_0(k)} = 1. \tag{30.24}$$

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 $S_0(\infty) = 1$.