

8 Rozpraszanie w jednym wymiarze

8.1 Współczynniki odbicia i transmisji

Dotychczas badając stany związane szukaliśmy rozwiązań równania Schrödingera, które znikają w $\pm\infty$. Jeżeli potencjał jest w $x = \pm\infty$ ograniczony od góry $V(x) < V_{\max}$ to zawsze możemy w dalekiej nieskończoności przestrzennej i czasowej (dla $t \rightarrow -\infty$) znaleźć rozwiązanie o energii $E > V_{\max}$, które odpowiada cząstce poruszającej się w stronę potencjału. W nierelatywistycznej mechanice kwantowej rozpraszanie rozumiemy jako proces zmiany funkcji falowej opisującej rozpraszany stan przy przejściu przez obszar działania znanego potencjału. W rzeczywistości źródłem potencjału jest inny obiekt, np. jądro atomowe w tzw. tarczy. Pełny opis uwzględniający ten fakt możliwy jest dopiero w relatywistycznej teorii pola.

Choć na pierwszy rzut oka wydaje się, że rozpraszanie cząstki na pewnym potencjale powinno być opisywane przy pomocy równania Schrödingera zależnego od czasu, to w praktyce stosuje się równoważny opis stacjonarny. Odpowiada to założeniu, że z nieskończoności nadbiega na zlokalizowany potencjał ciągły strumień cząstek. W przypadku jednowymiarowym cząstki te z pewnym prawdopodobieństwem odbijają się od potencjału oraz przechodzą „na drugą” stronę. Mamy więc do czynienia jeszcze z dwoma strumieniami: odbitym i przechodzącym. Zakładając, że potencjał jest zlokalizowany wokół $x = 0$ i, że $V(x) \rightarrow V$ dla $x \rightarrow -\infty$ oraz $V(x) \rightarrow V'$ dla $x \rightarrow \infty$ funkcje falowe dla $x \ll 0$ lub $x \gg 0$ opisywane są przez fale płaskie. Funkcja falowa cząstki padającej (z lewa na prawo) przyjmuje postać

$$\Psi_p(t, x) = A e^{-i\omega t + ikx} \text{ dla } x \ll 0, \quad (8.1)$$

gdzie energia i pęd cząstki dane są odpowiednio jako $E = \hbar\omega$ i $p = \hbar k$ a liczba falowa $k = \sqrt{2m(E - V)}/\hbar$. Rzeczywiście równanie stałej fazy $-\omega t + kx = \text{const}$ implikuje

$$x = \frac{\omega}{k}t + \text{const},$$

a zatem x rośnie wraz z upływem czasu, czyli cząstka porusza się w prawo. Z kolei rozwiązanie proporcjonalne do $e^{-i\omega t - ikx}$ odpowiada cząstce poruszającej się w lewo. Zatem funkcja falowa stanu końcowego opisująca odbicie i przejście przez potencjał ma postać

$$\begin{aligned} \Psi_k(t, x) &= B e^{-i\omega t - ikx} \text{ dla } x \ll 0 \\ &+ C e^{-i\omega t + ik'x} \text{ dla } x \gg 0 \end{aligned} \quad (8.2)$$

gdzie $k' = \sqrt{2m(E - V')}/\hbar$. Zauważmy, że energia jest zachowana, nie jest ona przekazywana do potencjału (czyli do cząstki będącej jego źródłem).

W podejściu stacjonarnym musimy zatem rozwiązać równanie Schrödingera z warunkami brzegowymi

$$\begin{aligned} \psi(x) &= A e^{+ikx} + B e^{-ikx} \text{ dla } x \ll 0 \\ \psi(x) &= C e^{+ik'x} \text{ dla } x \gg 0. \end{aligned} \quad (8.3)$$

Sens fizyczny współczynników A , B i C można odczytać z tzw. równania ciągłości. Rozpatrzmy zależne od czasu równanie Schrödingera i równanie do niego sprzężone pomnożone odpowiednio przez ψ^* i ψ :

$$\begin{aligned}\psi^*(x, t)i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x, t) &= -\frac{\hbar^2}{2m}\psi^*(x, t)\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x, t) + V(x)\psi^*(x, t)\psi(x, t) \\ -\psi(x, t)i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^*(x, t) &= -\frac{\hbar^2}{2m}\psi(x, t)\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi^*(x, t) + V(x)\psi(x, t)\psi^*(x, t)\end{aligned}\quad (8.4)$$

i odejmijmy je stronami mnożąc przez $-i/\hbar$:

$$\psi^*(x, t)\frac{\partial}{\partial t}\psi(x, t) + \psi(x, t)\frac{\partial}{\partial t}\psi^*(x, t) = i\frac{\hbar}{2m}\left[\psi^*(x, t)\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x, t) - \psi(x, t)\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi^*(x, t)\right].$$

Zauważmy, że człony te można zapisać, jako pełne pochodne

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi^*(x, t)\psi(x, t) = i\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial}{\partial x}\left[\psi^*(x, t)\frac{\partial}{\partial x}\psi(x, t) - \psi(x, t)\frac{\partial}{\partial x}\psi^*(x, t)\right].\quad (8.5)$$

Widzimy, że pierwszy człon ma sens gęstości prawdopodobieństwa

$$P(x, t) = |\psi(x, t)|^2,\quad (8.6)$$

a drugi pozwala na zdefiniowanie *gęstości prądu prawdopodobieństwa*

$$S(x, t) = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^*(x, t)\frac{\partial\psi(x, t)}{\partial x} - \psi(x, t)\frac{\partial\psi^*(x, t)}{\partial x}\right).\quad (8.7)$$

Równanie (8.5) można przepisać w postaci:

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial S}{\partial x} = 0.\quad (8.8)$$

Równanie to możemy scałkować po dx od $-\infty$ do $+\infty$. Dla rozwiązań zlokalizowanych (a więc nie dla rozpraszania) całka z $\partial S/\partial x$ znika, a z pierwszego członu dostajemy zachowanie prawdopodobieństwa

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_{-\infty}^{+\infty} dx P(x, t) = 0.\quad (8.9)$$

Oczywiście zachowanie prawdopodobieństwa jest podstawowym postulatem mechaniki kwantowej i powinno zachodzić także w przypadku rozpraszania.

W przypadku rozpraszania gęstość prądu S przyjmuje postać dla $x \ll 0$

$$S = -\frac{i\hbar}{m}(|A|^2 ik - |B|^2 ik) = \frac{p}{m}(|A|^2 - |B|^2) = v(|A|^2 - |B|^2)\quad (8.10)$$

i dla $x \gg 0$

$$S(x) = v' |C|^2, \quad (8.11)$$

gdzie $v = \hbar k/m$ oraz $v' = \hbar k'/m$ jest prędkością cząstki odpowiednio po lewej i po prawej stronie potencjału. Całkując równanie ciągłości z uwzględnieniem warunku (8.9) otrzymujemy

$$v' |C|^2 - v (|A|^2 - |B|^2) = 0. \quad (8.12)$$

Równanie to przybiera szczególnie prostą postać, jeżeli $V = V'$ ($v = v'$)

$$|A|^2 = |B|^2 + |C|^2, \quad (8.13)$$

co oznacza, że gęstość prądu prawdopodobieństwa dla odbicia i przejścia przez potencjał dają w sumie gęstość prawdopodobieństwa dla cząstek padających. Interpretacji poddają się jedynie stosunki

$$\left| \frac{B}{A} \right|^2, \quad \left| \frac{C}{A} \right|^2 \quad (8.14)$$

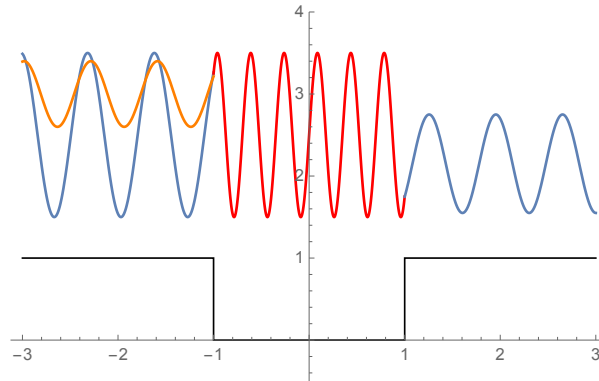
tzw. wsp. odbicia i przejścia, dlatego absolutna normalizacja jest nieistotna. Wygodna „norma” $A = 1/\sqrt{v}$, wówczas padający strumień wynosi 1.

8.2 Rozpraszanie na studni i barierze potencjału

W szczególnym przypadku symetrycznej studni potencjału ($V_0 > 0$)

$$V = \begin{cases} 0 & \text{dla } x < -a \\ -V_0 & \text{dla } -a \leq x \leq a \\ 0 & \text{dla } a < x \end{cases} \quad (8.15)$$

przypadek dla fali padającej z lewej strony jest pokazany na Rysunku 1.



Rysunek 1: Rozpraszanie na symetrycznej studni potencjału.

Aby znaleźć współczynniki odbicia i transmisji musimy zszyć rozwiązania po obu stronach studni z rozwiązaniami wewnątrz:

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_I(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & \text{dla } x < -a \\ \psi_{II}(x) = Ee^{iqx} + Fe^{-iqx} & \text{dla } -a \leq x \leq a \\ \psi_{III}(x) = Ce^{ikx} + De^{-ikx} & \text{dla } a < x \end{cases} \quad (8.16)$$

gdzie $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ oraz $q = \sqrt{2m(E + V_0)}/\hbar$. W przypadku, kiedy fala pada tylko z lewej strony $D = 0$, ale tu rozważymy przypadek ogólniejszy, kiedy cząstki mogą padać na potencjał także z prawej strony. Warunki zszycia przyjmują formę równań macierzowych na współczynniki $A, B, \dots F$:

$$\begin{aligned} \psi_I(-a) = \psi_{II}(-a) &\rightarrow M_1 \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = M_2 \begin{bmatrix} E \\ F \end{bmatrix}, \\ \psi'_I(-a) = \psi'_{II}(-a) & \\ \psi_{II}(a) = \psi_{III}(a) &\rightarrow M_3 \begin{bmatrix} E \\ F \end{bmatrix} = M_4 \begin{bmatrix} C \\ D \end{bmatrix}. \\ \psi'_{II}(a) = \psi'_{III}(a) & \end{aligned} \quad (8.17)$$

Równania te pozwalają na napisanie związku między rozwiązaniem z lewej i z prawej strony potencjału:

$$\begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = M_1^{-1} M_2 M_3^{-1} M_4 \begin{bmatrix} C \\ D \end{bmatrix} = M \begin{bmatrix} C \\ D \end{bmatrix}. \quad (8.18)$$

Z punktu widzenia eksperymentu interesuje nas raczej związek między strumieniem padającym a strumieniem odbitym i przechodzącym:

$$\begin{bmatrix} C \\ B \end{bmatrix} = S \begin{bmatrix} A \\ D \end{bmatrix}, \quad (8.19)$$

który definiuje macierz rozpraszania S . Łatwo pokazać, że

$$S = \frac{1}{M_{11}} \begin{bmatrix} 1 & -M_{12} \\ M_{21} & \det M \end{bmatrix}. \quad (8.20)$$

Na koniec zauważmy, że zamiast przejścia nad studnią potencjału możemy także rozpatrywać przejście nad lub przez barierę kiedy $V_0 < 0$. Przejście nad barierą odpowiada sytuacji gdy $E > |V_0|$, a tunelowanie, czyli przejście przez barierę (efekt czysto kwantowy) kiedy $0 < E < |V_0|$. W tym ostatnim przypadku $q = i\kappa$ jest urojone i rozwiązanie w obszarze II przyjmuje postać:

$$\psi_{II}(x) = Ee^{-\kappa x} + Fe^{+\kappa x}.$$

Warto zauważyć, że równanie (8.20) jest liniowe, w związku z czym nie możemy obliczyć absolutnych wartości współczynników A, B, C, D a tylko ich wartości w funkcji np. A lub C .

8.3 Przesunięcie fazowe

Szczególnie prosta jest sytuacja kiedy dla $x \leq 0$ potencjał jest nieskończony. Zatem świat dostępny cząstkom jest ograniczony do dodatniej półosi i $A = B = 0$. Fala D ma zatem sens fali padającej, a fala proporcjonalna do C , fali odbitej. Taki przypadek może wydać się niezrozumiały, ale jeżeli zastanowić się chwilę, to odpowiada on sytuacji w trzech wymiarach kiedy zmienna x zostaje zastąpiona przez zmienną radialną r , która jest

zawsze dodatnia. W trzech wymiarach dodatkowa komplikacja związana jest z zależnością kątową i będziemy o tym dyskutować w dalszej części tego wykładu.

W obszarze między $x = 0$ a jakimś skończonym $x = R$ mamy potencjał, o którym chcemy się czegoś dowiedzieć, badając falę odbitą proporcjonalną do C . W przypadku, kiedy nie byłoby potencjału, jedyną więc jaką mamy na rozwiązanie swobodnego równania Schrödingera to wymóg znikania funkcji falowej w $x = 0$. Zatem

$$\phi(x) = \sin(kx) = \frac{1}{2i} (e^{ikx} - e^{-ikx}), \quad (8.21)$$

gdzie opuszcziliśmy całkowitą normalizację. Rozpisanie sinusa na eksponenty pozwala na wyodrębnienie fali padającej (z prawa na lewo) i odbitej

$$\begin{aligned} \phi_{\text{pad.}}(x) &= -\frac{1}{2i} e^{-ikx} \rightarrow D = -\frac{1}{2i} \\ \phi_{\text{odb.}}(x) &= \frac{1}{2i} e^{+ikx} \rightarrow C = \frac{1}{2i}. \end{aligned} \quad (8.22)$$

Jeżeli teraz w obszarze $0 \leq x \leq R$ włączymy potencjał, to modyfikacji ulegnie tylko fala odbita. Ponieważ zachowanie prądu wymaga, żeby

$$|C| = |D|,$$

to jedyny możliwy efekt pochodzący od potencjału, to zmiana fazy

$$C \rightarrow \frac{1}{2i} e^{2i\delta(k)}. \quad (8.23)$$

Tak zdefiniowaną wielkość $\delta(k)$ nazywamy przesunięciem fazowym. Oczywiście przesunięcie fazowe jest określone z dokładnością do π . Typowo jednak definiuje się je począwszy od punktu odniesienia jakim jest $\delta(k=0)$, tak że funkcja $\delta(k)$ zmienia się wraz ze wzrostem energii.

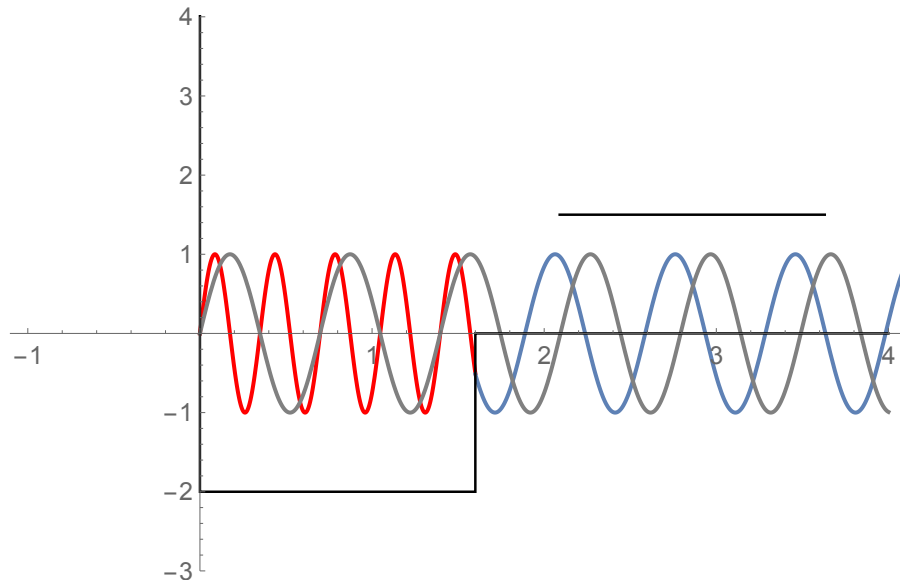
Pełna funkcja falowa zdala od potencjału $x \gg R$ ma zatem postać

$$\psi(x) = \frac{1}{2i} (e^{ikx+2i\delta(k)} - e^{-ikx}) = e^{i\delta(k)} \sin(kx + \delta(k)).$$

Oczywiście w obszarze działania potencjału dokładna funkcja falowa jest dużo bardziej skomplikowana. Jednakże to co mierzymy doświadczalnie, to właśnie asymptotyka funkcji falowej, gdyż detektory są umieszczane zdala od obszaru interakcji cząstki z potencjałem (czyli z inną cząstką).

Porównajmy teraz dwa rozkłady prawdopodobieństwa: bez potencjału $|\phi(x)|^2$ i z potencjałem $|\psi(x)|^2$. Widzimy, że tę samą wartość prawdopodobieństwa, np. $\sin^2(a)$, otrzymujemy dla różnych wartości x :

$$\begin{array}{ll} x = a/k & \text{bez potencjału} \\ x = a/k - \delta(k)/k & \text{z potencjałem} \end{array} \quad (8.24)$$



Rysunek 2: Rozpraszanie na studni potencjału w obecności sztywnej ściany. Czerwona krzywa jest szybko oscylującym rozwiązaniem wewnątrz studni spełniającym warunek brzegowy w $x = 0$. Niebieskie rozwiązanie reprezentuje przypadek bez potencjału zszyty gładko z rozwiązaniem wewnątrz studni. Szara krzywa odpowiada rozwiązaniu bez potencjału spełniającemu warunek brzegowy w $x = 0$. Widzimy, że rozwiązanie niebieskie zostało przesunięte w kierunku początku układu o ponad dwa okresy.

Jeżeli $\delta(k) > 0$, to rozkład prawdopodobieństwa dla przypadku z potencjałem jest przesunięty w kierunku początku układu współrzędnych. Taki potencjał nazywamy przyciągającym. Typowym przykładem jest umieszczona w obszarze $0 \leq x \leq R$ studnia potencjału, Rys. 2. Dla bariery zachodzi odwrotne zjawisko $\delta(k) < 0$ i rozwiązanie ϕ jest „wypychane” na prawo. Zatem badając znak przesunięcia fazowego możemy określić typ potencjału, na którym nastąpiło rozproszenie.

Przesunięcie fazowe można także wprowadzić dla potencjałów, dla których nie zachodzi odbicie. Wówczas zachowanie prądu prawdopodobieństwa implikuje, że amplituda fali przechodzącej różni się od amplitudy fali padającej jedynie o czynnik fazowy. Przykład takiego potencjału

$$V(x) = -V_0 \frac{1}{\cosh^2(x)}$$

jest dyskutowany w podręczniku mechaniki kwantowej Landaua i Lifszycy (zadanie 5, strona 81 i zadanie 4 strona 88, wydanie polskie PWN 1979).

Na koniec wprowadzimy pojęcie fali rozproszonej, jako różnicę między rozwiązaniem

z potencjałem a rozwiązaniem bez potencjału:

$$\begin{aligned}
 \psi(x) = \phi(x) + \psi_{\text{rozpr.}}(x) \rightarrow \psi_{\text{rozpr.}}(x) &= \frac{1}{2i} (e^{ikx+2i\delta(k)} - e^{-ikx}) - \frac{1}{2i} (e^{ikx} - e^{-ikx}) \\
 &= \frac{1}{2i} (e^{ikx+2i\delta(k)} - e^{ikx}) \\
 &= \frac{1}{2i} e^{ikx} e^{i\delta(k)} \sin \delta(k). \tag{8.25}
 \end{aligned}$$

Widzimy, że fala rozproszona jest falą płaską poruszająca się w prawo o amplitudzie

$$A_{\text{rozpr.}} = \frac{1}{2i} e^{i\delta(k)} \sin \delta(k)$$

proporcjonalnej do $\sin \delta$, która znika, kiedy nie ma rozpraszania, czyli dla $\delta(k) = 0$. Oczywiście fala rozproszona znika także dla $\delta(k) = n\pi$, co może zajść dla pewnych energii rozpraszania. To zjawisko nazywa się efektem Ramsaurea-Townsend'a.

8.4 Twierdzenie Levinsona

Twierdzenie Lewinsona pozwala na powiązanie przesunięć fazowych $\delta(k)$, które zdefiniowane są dla energii dodatnich, z liczbą stanów związanych w danym potencjale, które odpowiadają energiom ujemnym. Wiemy że dla skończonej studni potencjału liczba stanów związanych zależy od parametrów studni. W szczególności dla studni o szerokości $2a$ i głębokości $-V_0$ ($V_0 > 0$) liczba stanów związanych zależy od wielkości

$$r^2 = \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}. \tag{8.26}$$

Załóżmy, że w sposób ciągły manipulujemy np. głębokością potencjału zwiększając ją od $V_0 = 0$. Zmiana potencjału ma dwa efekty: za każdym razem kiedy r przekracza wartość $n\pi/2$ w studni pojawia się nowy stan związany. Jednocześnie pewnym zmianom ulega spektrum poziomów rozproszonych o dodatniej energii. Podstawą twierdzenia Levinsona jest obserwacja, że w czasie adiabaticznej zmiany parametrów potencjału poziomy energetyczne mogą się przesuwać, ale nie „rodzą się” ani nie „znikają”. Żeby zbadać co się dzieje przy zmianie parametrów potencjału zamknijemy cały układ w pudełku o rozmiarze $L \gg R = 2a$.

Rozważmy najpierw sytuację z poprzedniego paragrafu, gdzie w $x = 0$ umieszczona jest sztywna ściana odpowiadająca $V = \infty$. Znamy rozwiązania asymptotyczne dla $x \gg R$ zarówno bez potencjału jak i z potencjałem:

$$\begin{aligned}
 \phi(x) &= \sin(kx), \\
 \psi(x) &= e^{i\delta(k)} \sin(kx + \delta(k)).
 \end{aligned}$$

Teraz dodajmy drugą ścianę w $x = L$. Stany o dodatniej energii są teraz skwantowane

$$kL = n\pi, \quad kx + \delta(k) = n'\pi. \tag{8.27}$$

Ponieważ spektrum jest dyskretne, możemy policzyć ile mamy stanów na małym odcinku dk . Liczba stanów o dodatniej energii dla sytuacji bez potencjału na odcinku dk wynosi

$$dn = \frac{L}{\pi} dk. \quad (8.28)$$

Natomiast dla przypadku z potencjałem warunek kwantyzacji implikuje

$$dn' = \frac{L}{\pi} dk + \frac{1}{\pi} \frac{d\delta(k)}{dk} dk \quad (8.29)$$

co odpowiada liczbie stanów o dodatniej energii na odcinku dk w przypadku potencjału.

Możemy sobie teraz odpowiedzieć na pytanie, jak zmieniła się liczba stanów z powodu włączenia potencjału:

$$d(\Delta n) = dn - dn' = -\frac{1}{\pi} \frac{d\delta(k)}{dk} dk. \quad (8.30)$$

Jeśli $d(\Delta n)$ jest dodatnia, to w wyniku włączenia potencjału liczba stanów o dodatniej energii na odcinku dk zmalała, jeśli ujemna to wzrosła. Aby obliczyć całkowitą zmianę liczby stanów musimy równanie (8.30) scałkować po dk

$$\Delta n = -\frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{d\delta(k)}{dk} dk = \frac{1}{\pi} (\delta(0) - \delta(\infty)) \quad (8.31)$$

gdzie Δn oznacza całkowitą liczbę stanów która zniknęła ze spektrum stanów o dodatniej energii, a zatem przesunęła się do części spektrum o ujemnej energii. A więc jest to liczba stanów związanych. Ta liczba nie zależy ani od L , ani od R , możemy zatem wziąć limit $L \rightarrow \infty$ i $R \rightarrow \infty$ w taki sposób, że $L - R \rightarrow \infty$. W ten sposób pozbywamy się regulatora (także ściany z lewej strony), ale wynik jest od tego niezależny.