

25 Rozpraszanie, przybliżenie Borna

25.1 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:

$$u_i(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_i\mathbf{r}}, \quad u_f(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_f\mathbf{r}}. \quad (25.1)$$

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

$$\mathbf{S}_i = -\frac{i\hbar}{2m} \left(u_i^*(\mathbf{r}) \vec{\nabla} u_i(\mathbf{r}) - u_i(\mathbf{r}) \vec{\nabla} u_i^*(\mathbf{r}) \right) = \frac{\hbar}{m} \mathbf{k}_i. \quad (25.2)$$

Zauważmy, że za funkcję u_i przyjęliśmy *nieznormalizowaną* falę płaską (25.1). Składowe wektora \vec{S}_i mają podobnie jak w przypadku jednowymiarowym wymiar prędkości, czyli liczby padających cząstek na jednostkę czasu.

Równanie Schrödingera

$$(\nabla^2 + k^2) \psi(\mathbf{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \quad (25.3)$$

zamienimy w równanie całkowe i będziemy go rozwiązywać iteracyjnie. Warto tu zauważyć, że (25.3) można potraktować jako niejednorodne równanie różniczkowe drugiego rzędu, gdzie członem źródłowym jest

$$j(\mathbf{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}). \quad (25.4)$$

Takie potraktowanie równania (25.3) jest w pewnym sensie niestandardowe, gdyż na ogół źródłem jest znana, zadana funkcja, a nie funkcja zawierająca funkcję poszukiwaną (w tym wypadku ψ).

25.2 Funkcja Greena

Rozwiązanie niejednorodnego równania typu

$$(\nabla_r^2 + k^2) \psi(\mathbf{r}) = j(\mathbf{r}) \quad (25.5)$$

znajdujemy konstruując funkcję Greena zdefiniowaną jako

$$(\nabla_r^2 + k^2) G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (25.6)$$

Wówczas

$$\psi(\mathbf{r}) = u_i(\mathbf{r}) + \int d^3r' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') j(\mathbf{r}'), \quad (25.7)$$

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 $G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ (f. Greena zawsze zależy od różnicy argumentów) w postaci transformaty Fouriera:

$$\begin{aligned}\delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') &= \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}, \\ G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') &= \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \tilde{G}(\mathbf{q}),\end{aligned}\quad (25.8)$$

Podstawiając (25.8) równania do obu stron równania (25.6) otrzymujemy

$$\tilde{G}(\mathbf{q}) = \frac{1}{k^2 - q^2}. \quad (25.9)$$

Widzimy zatem, że po pierwsze funkcja Greena \tilde{G} nie zależy od kierunku, a po drugie, że możemy mieć kłopoty z drugą transformatą Fouriera (25.8), żeby wyliczyć G . Rzeczywiście

$$G(\mathbf{x}) = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{q}\mathbf{x}} \frac{1}{k^2 - q^2} \quad (25.10)$$

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

$$\begin{aligned}G(\mathbf{x}) &= \int_0^\infty \frac{q^2 dq}{(2\pi)^3} \frac{1}{k^2 - q^2} \int_0^\pi d\varphi \int_{-1}^1 d \cos \theta e^{iqx \cos \theta} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{1}{ix} \int_0^\infty \frac{q dq}{k^2 - q^2} (e^{iqx} - e^{-iqx}).\end{aligned}\quad (25.11)$$

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

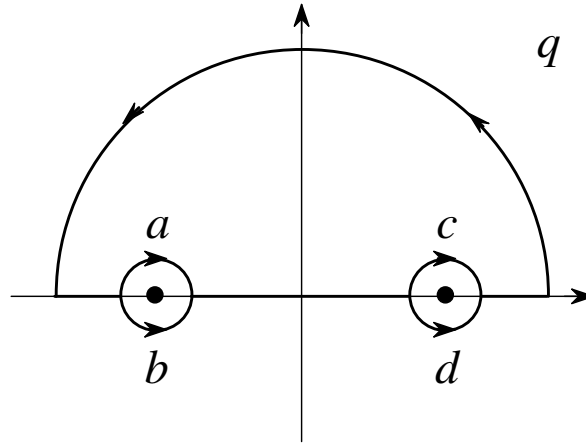
$$G(x) = \frac{i}{(2\pi)^2 x} \int_{-\infty}^\infty \frac{q dq}{(q - k)(q + k)} e^{iqx}, \quad (25.12)$$

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

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

$$G_+(x) = -\frac{1}{4\pi x} e^{ikx}, \quad (25.13)$$



Rysunek 1: Osobliwości w płaszczyźnie zespolonego q .

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

$$G_-(x) = -\frac{1}{4\pi x} e^{-ikx}, \quad (25.14)$$

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

$$G(x) = \frac{1}{2}G_+(x) + \frac{1}{2}G_-(x). \quad (25.15)$$

Wybraliśmy tu czynnik $1/2$ aby spełnione było równanie (25.6).

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

$$\begin{aligned} x &= |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = \sqrt{r^2 + r'^2 - 2rr' \cos \theta} \\ &\simeq r \sqrt{1 - 2\frac{r'}{r} \cos \theta} \simeq r - r' \cos \theta \end{aligned} \quad (25.16)$$

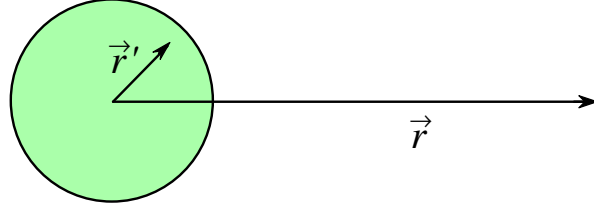
i dalej

$$kx \simeq kr - \mathbf{k}_f \mathbf{r}', \quad (25.17)$$

gdzie

$$\mathbf{k}_f = k \frac{\mathbf{r}}{r} \quad (25.18)$$

jest wektorem skierowanym wzdłuż promienia \mathbf{r} o module równym k (zachowanie energii!). Zatem, jeśli we wzorze (25.7) 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.

25.3 Amplituda rozpraszania

Podstawiając do (25.7) G_+ i j dane równaniem (25.4) otrzymujemy:

$$\psi(\mathbf{r}) = u_i(\mathbf{r}) - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}'). \quad (25.19)$$

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

$$V \rightarrow \lambda V \quad (25.20)$$

i rozwijając

$$\psi = \psi^{(0)} + \lambda\psi^{(1)} + \lambda^2\psi^{(2)} + \dots \quad (25.21)$$

Otrzymujemy wówczas rekurencję

$$\begin{aligned} \psi^{(0)}(\mathbf{r}) &= u_i(\mathbf{r}), \\ \psi^{(n)}(\mathbf{r}) &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}')\psi^{(n-1)}(\mathbf{r}') \end{aligned} \quad (25.22)$$

co daje

$$\begin{aligned} \psi^{(1)}(\mathbf{r}) &= -\frac{m}{\pi\hbar^2} \int d^3r' \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}')u_i(\mathbf{r}') \\ \psi^{(2)}(\mathbf{r}) &= \left(\frac{m}{\pi\hbar^2}\right)^2 \int d^3r' \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}') \int d^3r'' \frac{e^{ik|\mathbf{r}'-\mathbf{r}''|}}{|\mathbf{r}'-\mathbf{r}''|} V(\mathbf{r}'')u_i(\mathbf{r}'') \end{aligned} \quad (25.23)$$

i tak dalej. Zauważmy, że dla $r \gg r'$ i dla zlokalizowanych potencjałów możemy użyć przybliżenia (25.16) i (25.17) pod pierwszą całką po dr' :

$$\begin{aligned} \psi^{(1)}(\mathbf{r}) &= -\frac{m}{\pi\hbar^2} \int d^3r' e^{-ik_f r'} V(\mathbf{r}')u_i(\mathbf{r}') \times \frac{e^{ikr}}{r} \\ \psi^{(2)}(\mathbf{r}) &= \left(\frac{m}{\pi\hbar^2}\right)^2 \int d^3r' e^{-ik_f r'} V(\mathbf{r}') \int d^3r'' \frac{e^{ik|\mathbf{r}'-\mathbf{r}''|}}{|\mathbf{r}'-\mathbf{r}''|} V(\mathbf{r}'')u_i(\mathbf{r}'') \times \frac{e^{ikr}}{r}. \end{aligned} \quad (25.24)$$

Wzór (25.24) ma bardzo prostą interpretację fizyczną: kolejne przybliżenia odpowiadają kolejnym rozproszeniom na potencjale V przepłatanym propagacją swobodną opisaną funkcją Greena (25.13).

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

$$\psi(\mathbf{r}) = u_i(\mathbf{r}) + A_{fi} \times \frac{e^{ikr}}{r}, \quad (25.25)$$

gdzie

$$A_{fi} = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' u_f^*(\mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \langle u_f | V | \psi \rangle \quad (25.26)$$

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 \mathbf{k}_f). Podstawiając za ψ_i kolejne przybliżenia (25.24) otrzymujemy kolejne przybliżenia dla amplitudy rozpraszania. W pierwszym rzędzie dostajemy tzw. *przybliżenie Borna*:

$$\begin{aligned} A_{fi} &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' u_f^*(\mathbf{r}') V(\mathbf{r}') u_i(\mathbf{r}') \\ &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' e^{-i(\mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i) \cdot \mathbf{r}'} V(\mathbf{r}'). \end{aligned} \quad (25.27)$$

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