26 Rozpraszanie, przekrój czynny, twierdzenie optyczne

26.1 Przekrój czynny

Rozpraszanie przyjęło się charakteryzować za pomocą różniczkowego przekroju czynnego. Aby zdefiniować przekrój czynny przypomnijmy sobie najpierw tzw. równanie ciągłości

$$\frac{\partial}{\partial t}P(\boldsymbol{r},t)+\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{S}=0,$$

gdzie $P=|\psi|^2$ jest gęstością prawdopodobieństwa a wektor $\boldsymbol{S}$

$$\boldsymbol{S}=-\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^*\,\boldsymbol{\nabla}\psi-\psi\,\boldsymbol{\nabla}\psi^*\right) \tag{26.1}$$

nosi nazwę gęstości *prądu prawdopodobieństwa*. Wektor $\boldsymbol{S}$ ma wymiar $cm/\left(s\times cm^3\right)=1/\left(s\times cm^2\right)$. Opisuje on zatem liczbę cząstek padających w kierunku $\boldsymbol{S}/\left|\boldsymbol{S}\right|$ na jednostkę powierzchni, na jednostkę czasu. W przypadku rozpraszania przyjęliśmy normalizację, w której funkcja falowa jest bezwymiarowa:

$$\psi(\boldsymbol{r})=u_i(\boldsymbol{r})+A_{fi}\times\frac{e^{ikr}}{r} \tag{26.2}$$

(brak czynnika normalizacyjnego przy u_i). Wówczas wektor $\boldsymbol{S}$ jest proporcjonalny do liczby cząstek padających w jednostce czasu.

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

$$dN_f=S_f^r\,r^2d\Omega \tag{26.3}$$

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

$$S_f^r=-\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi_f^*\frac{\partial\psi_f}{\partial r}-\psi_f\frac{\partial\psi_f^*}{\partial r}\right)=\frac{\hbar k}{mr^2}\left|A_{fi}\right|^2. \tag{26.4}$$

Zwróćmy uwagę, że aby S_f^r miało wymiar prędkości, A_{fi} musi mieć wymiar długości [cm].

Całkowita liczba cząstek padających na jednostkę czasu na jednostkę powierzchni dana jest wzorem:

$$N_i=\left|\boldsymbol{S}_i\right|=\frac{\hbar k_i}{m}. \tag{26.5}$$

Różniczkowy przekrój czynny definiujemy jako

$$d\sigma(\theta,\varphi)=\frac{dN_f}{N_i}=\frac{S_f^r r^2d\Omega}{\left|\boldsymbol{S}_i\right|}=\frac{k}{k_i}\left|A_{fi}\right|^2d\Omega \tag{26.6}$$

przy czym dla rozpraszania elastycznego (z zachowaną energią $k=k_i$) mamy

$$\frac{d\sigma(\theta,\varphi)}{d\Omega}=\left|A_{fi}(\theta,\varphi)\right|^2. \tag{26.7}$$

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 (26.6)

26.2 Fale kuliste

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

$$\frac{d^2}{dr^2}R_{kl} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}R_{kl} + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2m}{\hbar^2}V(r)\right)R_{kl} = 0, \tag{26.8}$$

a pełna funkcja falowa dana jest wzorem

$$\psi_{klm}(\boldsymbol{r}) = R_{kl}(r)Y_l^m(\theta,\varphi). \tag{26.9}$$

Na funkcje te narzucimy warunek unormowania

$$\int d^3r\, \psi^*_{k'l'm'}\psi_{klm} = \delta_{ll'}\delta_{mm'}\, 2\pi\delta(k-k'), \tag{26.10}$$

co tłumaczy się na funkcje radialne

$$\int\limits_0^\infty dr\, r^2 R_{k'l}R_{kl} = 2\pi\delta(k-k') \tag{26.11}$$

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

Rozwiążmy równanie (26.8) 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 (26.8) można przepisać

$$\frac{d^2}{dr^2}(rR_{k0}) + k^2(rR_{k0}) = 0. \tag{26.12}$$

Równanie to ma dwa rozwiązania:

$$rR = \sin kr \qquad \text{lub} \qquad rR = \cos kr. \tag{26.13}$$

Zatem rozwiązanie skończone w zerze i unormowane ma postać

$$R_{k0} = 2\frac{\sin kr}{r}. \tag{26.14}$$

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

$$j_0(x) = \frac{\sin x}{x} \tag{26.15}$$

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

$$y_0(x) = -\frac{\cos x}{x} \tag{26.16}$$

Dla $l \neq 0$ podstawmy

$$R_{kl} = r^l \chi_{kl}. \tag{26.17}$$

Wówczas

$$\chi''_{kl} + \frac{2(l+1)}{r}\chi'_{kl} + k^2\chi_{kl} = 0. \tag{26.18}$$

Zróżniczkujmy równanie (26.18) po r:

$$\chi'''_{kl} + \frac{2(l+1)}{r}\chi''_{kl} + \left(k^2 - \frac{2(l+1)}{r^2}\right)\chi'_{kl} = 0. \tag{26.19}$$

Dokonajmy teraz podstawienia

$$\chi'_{kl} = r f_{kl} \tag{26.20}$$

i podstawmy do równania (26.19):

$$f''_{kl} + \frac{2(l+2)}{r}f'_{kl} + k^2 f_{kl} = 0. \tag{26.21}$$

Zauważmy, że jest to równanie identyczne z równaniem (26.18) dla $l \to l+1$. A zatem

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

czyli

$$\chi_{k\,l+1} = \frac{1}{r}\chi'_{kl}. \tag{26.22}$$

Stąd rekurencja

$$\chi_{kl} = \left(\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\right)^l \chi_{k0}. \tag{26.23}$$

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

$$j_l(x) = x^l\left(-\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^l \frac{\sin x}{x}, \qquad y_l(x) = -x^l\left(-\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^l \frac{\cos x}{x}, \tag{26.24}$$

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:

$$\begin{aligned} R_{kl} &= 2(-)^l\left(\frac{r}{k}\right)^l\left(\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\right)^l\frac{\sin kr}{r} \\ &= 2kj_l(kr) = 2\sqrt{\frac{\pi}{2kr}}J_{l+1/2}(kr). \end{aligned} \tag{26.25}$$

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

$$-\frac{d}{dr}\sin kr = -k\cos kr = k\sin\left(kr - \frac{\pi}{2}\right). \tag{26.26}$$

Stąd już łatwo pokazać

$$R_{kl} \approx \frac{2}{r}\sin\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right). \tag{26.27}$$

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

$$j_l(x) \sim \frac{\sin(x - l\pi/2)}{x}, \qquad y_l(x) \sim -\frac{\cos(x - l\pi/2)}{x}. \tag{26.28}$$

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

$$R_{kl} \approx \frac{2}{r}\sin\left(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l(k)\right) \tag{26.29}$$

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

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

$$V(r) = \begin{cases} \infty & \text{dla} \quad r < a \\ 0 & \text{dla} \quad r \geq a \end{cases}. \tag{26.30}$$

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

$$R_{k0}(a) = 0 \tag{26.31}$$

ma postać

$$R_{k0} = 2\frac{\sin k(r-a)}{r} = 2\frac{\sin(kr - ka)}{r}. \tag{26.32}$$

Czyli

$$\delta_0(k) = -ka. \tag{26.33}$$

Dla dowolnej funkcji parcjalnej zapisujemy

$$R_{kl}(r) = A_l j_l(kr) + B_l y_l(kr). \tag{26.34}$$

Z równania (26.31) wynika

$$\frac{B_l}{A_l} = -\frac{j_l(ka)}{y_l(ka)}. \tag{26.35}$$

Asymptotycznie dla dużych r funkcja (26.34) zgodnie ze wzorami (26.28) przyjmuje postać

$$\begin{aligned} R_{kl}(r) &\sim \frac{1}{kr}\left[A_l \sin(kr - l\pi/2) - B_l \cos(kr - l\pi/2)\right] \\ &= \frac{\sqrt{A_l^2 + B_l^2}}{kr}\left[\frac{A_l}{\sqrt{A_l^2 + B_l^2}}\sin(kr - l\pi/2) - \frac{B_l}{\sqrt{A_l^2 + B_l^2}}\cos(kr - l\pi/2)\right]. \end{aligned} \tag{26.36}$$

Możemy zapisać

$$\frac{A_l}{\sqrt{A_l^2 + B_l^2}} = \cos\delta_l, \quad -\frac{B_l}{\sqrt{A_l^2 + B_l^2}} = \sin\delta_l. \tag{26.37}$$

Rzeczywiście

$$\sin^2\delta_l + \cos^2\delta_l = 1 \tag{26.38}$$

i

$$\frac{-B_l}{A_l} = \tan\delta_l(k) \qquad \text{czyli} \qquad \delta_l(k) = \arctan\frac{j_l(ka)}{y_l(ka)}. \tag{26.39}$$

Wówczas dostajemy

$$\begin{aligned} R_{kl}(r) &\sim \frac{\sqrt{A_l^2 + B_l^2}}{kr}\left[\cos\delta_l \sin(kr - l\pi/2) + \sin\delta_l \cos(kr - l\pi/2)\right] \\ &= \frac{\sqrt{A_l^2 + B_l^2}}{kr}\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l(k)\right). \end{aligned} \tag{26.40}$$

Dla $l = 0$ mamy

$$\delta_0(k) = \arctan\left(\frac{\sin(ka)}{-\cos(ka)}\right) = -ka \tag{26.41}$$

zgodnie ze wzorem (26.33).

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:

$$j_l(x) \sim \frac{x^l}{(2l+1)!!}, \quad y_l(x) \sim -\frac{(2l-1)!!}{x^{l+1}}, \tag{26.42}$$

gdzie

$$(2l+1)!! = 1 \cdot 3 \cdot 5 \cdot \ldots \cdot (2l+1). \tag{26.43}$$

Zatem dla $k \to 0$

$$\tan\delta_l(k) \sim -(ka)^{2l+1} \tag{26.44}$$

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

$$\delta_l(k) \sim -(ka)^{2l+1}. \tag{26.45}$$

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.