

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

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

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

$$\mathbf{S} = -\frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \quad (26.1)$$

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

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

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

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

$$dN_f = S_f^r r^2 d\Omega \quad (26.3)$$

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

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

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:

$$N_i = |\mathbf{S}_i| = \frac{\hbar k_i}{m}. \quad (26.5)$$

Różniczkowy przekrój czynny definiujemy jako

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

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

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

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:

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

a pełna funkcja falowa dana jest wzorem

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

Na funkcje te narzucimy warunek unormowania

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

co tłumaczy się na funkcje radialne

$$\int_0^\infty dr r^2 R_{k'l} R_{kl} = 2\pi \delta(k - k') \quad (26.11)$$

(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

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

Równanie to ma dwa rozwiązania:

$$rR = \sin kr \quad \text{lub} \quad rR = \cos kr. \quad (26.13)$$

Zatem rozwiązanie skończone w zerze i unormowane ma postać

$$R_{k0} = 2 \frac{\sin kr}{r}. \quad (26.14)$$

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

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

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

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

Dla $l \neq 0$ podstawmy

$$R_{kl} = r^l \chi_{kl}. \quad (26.17)$$

Wówczas

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

Zróźniczkujemy równanie (26.18) po r :

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

Dokonajmy teraz podstawienia

$$\chi_{kl}' = r f_{kl} \quad (26.20)$$

i podstawmy do równania (26.19):

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

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

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

czyli

$$\chi_{k\ l+1} = \frac{1}{r} \chi_{kl}'. \quad (26.22)$$

Stąd rekurencja

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Stąd już łatwo pokazać

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

ma postać

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

Czyli

$$\delta_0(k) = -ka. \quad (26.33)$$

Dla dowolnej funkcji parcjalnej zapisujemy

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

Z równania (26.31) wynika

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

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

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

Możemy zapisać

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

Rzeczywiście

$$\sin^2 \delta_l + \cos^2 \delta_l = 1 \quad (26.38)$$

i

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

Wówczas dostajemy

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

Dla $l = 0$ mamy

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

zgodnie ze wzorem (26.33).

Warto zastanowić się nad rozpraszaniem przy małych energiach $k \rightarrow 0$. W tym celu skorzystamy ze znanych wzorów na zachowanie sferycznych funkcji Bessel'a w zerze:

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

gdzie

$$(2l+1)!! = 1 \cdot 3 \cdot 5 \cdot \dots \cdot (2l+1). \quad (26.43)$$

Zatem dla $k \rightarrow 0$

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

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

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

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.

26.3 Fale parcjalne

Rozwiązanie równania Schrödingera (26.8), 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

$$A_{fi} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) a_l(k) P_l(\cos \theta). \quad (26.46)$$

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

$$\psi = e^{ikz} + A_{fi} \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (26.47)$$

Pokażemy najpierw, że swobodna fala płaska ma rozwinięcie

$$u_i(\mathbf{r}) = e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \theta) \quad (26.48)$$

Wzór (26.48) można udowodnić korzystając z tożsamości

$$j_l(kr) = \frac{1}{2i^l} \int_{-1}^1 d \cos \theta P_l(\cos \theta) e^{ik \cos \theta} \quad (26.49)$$

i warunku unormowania wielomianów Legendre'a

$$\int_{-1}^1 d \cos \theta P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'}. \quad (26.50)$$

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

$$\begin{aligned} j_l(kr) &= \frac{1}{2k} R_{kl}(r) \sim \frac{1}{kr} \sin \left(kr - \frac{\pi l}{2} \right) \\ &= \frac{1}{2ik} \left[\frac{e^{i(kr - \pi l/2)}}{r} - \frac{e^{-i(kr - \pi l/2)}}{r} \right] \\ &= \frac{1}{2ik} e^{-i\pi l/2} \left[\frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{-i(kr - \pi l)}}{r} \right]. \end{aligned} \quad (26.51)$$

Zauważmy, że

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

i stąd

$$u_i(\mathbf{r}) = e^{ikz} = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left[\frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{-i(kr-\pi l)}}{r} \right] P_l(\cos \theta). \quad (26.52)$$

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

Z kolei dla całej funkcji ψ (26.47) możemy napisać analogiczne rozwinięcie asymptotyczne

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) A_l(k) \left[\frac{e^{i(kr+\delta_l(k))}}{r} - \frac{e^{-i(kr-\pi l+\delta_l(k))}}{r} \right] P_l(\cos \theta), \quad (26.53)$$

gdzie $A_l(k)$ jest pewną stałą. Ponieważ potencjał $V(r)$ modyfikuje *tylko falę wychodzącą*, to fala wchodząca we wzorze (26.53) i we wzorze (26.52) muszą mieć taki sam współczynnik. Stąd

$$A_l(k) = e^{i\delta_l(k)} \quad (26.54)$$

i dalej

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) &= \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left[\frac{e^{i(kr+2\delta_l(k))}}{r} - \frac{e^{-i(kr-\pi l)}}{r} \right] P_l(\cos \theta) \\ &= \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left[\frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{-i(kr-\pi l)}}{r} \right] P_l(\cos \theta) \\ &+ \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left[\frac{e^{i(kr+2\delta_l(k))}}{r} - \frac{e^{ikr}}{r} \right] P_l(\cos \theta). \end{aligned}$$

Czyli

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{ikz} + \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{e^{2i\delta_l(k)} - 1}{2ik} P_l(\cos \theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (26.55)$$

i stąd:

$$a_l = \frac{e^{2i\delta_l(k)} - 1}{2ik} = e^{i\delta_l(k)} \frac{\sin \delta_l(k)}{k} \quad (26.56)$$

co daje

$$A_{fi} = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l(k)} \sin \delta_l(k) P_l(\cos \theta). \quad (26.57)$$

Warto wprowadzić funkcję S_l zdefiniowaną jako

$$S_l(k) = e^{2i\delta_l(k)}. \quad (26.58)$$

Podstawiając ten ostatni wzór na amplitudę rozproszenia i wykonując całkę po kątach przy pomocy wzoru (26.50) otrzymujemy wzór na całkowity przekrój czynny

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k). \quad (26.59)$$

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

$$\begin{aligned} \frac{1}{i}(S_l - 1) &= \frac{e^{2i\delta_l(k)} - 1}{i} = \frac{1}{i}(\cos 2\delta_l + i \sin 2\delta_l - 1) \\ &= \sin 2\delta_l - i(\cos^2 \delta_l - \sin^2 \delta_l - 1) \\ &= \sin 2\delta_l + 2i \sin^2 \delta_l. \end{aligned} \quad (26.60)$$

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

$$\text{Im } A_{fi}(\theta = 0) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l. \quad (26.61)$$

A stąd już trywialnie wynika *twierdzenie optyczne*:

$$\sigma = \frac{4\pi}{k} \text{Im } A_{fi}(\theta = 0). \quad (26.62)$$

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

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k) \simeq \frac{4\pi}{k^2} \delta_0^2(k) \simeq 4\pi a^2. \quad (26.63)$$

Zwróćmy uwagę, że klasycznie spodziewalibyśmy się, że $\sigma \simeq \pi a^2$ czyli powierzchni widzialnej 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.

26.4 Rozpraszanie na barierze lub skończonej studni

Rozważmy rozpraszanie na potencjale

$$V = \begin{cases} \pm V_0 & \text{dla } 0 \leq r \leq a \\ 0 & \text{dla } a < r \end{cases},$$

gdzie $V_0 > 0$ jest miarą wysokości (głębokości potencjału), zaś a jego zasięgiem. Aby ułatwić sobie dyskusję, rozważmy rozpraszanie przy małych energiach, gdy $k \rightarrow 0$, tak że dominujący wkład do przekroju czynnego wnosi fala s . Na zewnątrz studni funkcja $u_k(r) = rR_{k0}(r)$ spełnia znane nam równanie (26.12)

$$\frac{d^2}{dr^2} u_k + k^2 u_k = 0. \quad (26.64)$$

Rozwiązanie tego równania zapiszmy jako

$$u_{\text{out}}(r) = A \sin(kr + \delta_0) \quad (26.65)$$

Wewnątrz bariery (studni) mamy to samo równanie z

$$k \rightarrow k' = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E \mp V_0)}. \quad (26.66)$$

Rozwiązaniem spełniającym warunek brzegowy w $r = 0$ jest

$$u_{\text{in}}(r) = \sin(k'r)$$

ze stałą normalizacyjną równą 1. Aby otrzymać pełne rozwiązanie musimy w $r = a$ zszyć funkcje u_{out} i u_{in} oraz ich pochodne, a następnie dobrać stałą normalizacyjną pełnego rozwiązania. Dwa warunki

$$u_{\text{out}}(a) = u_{\text{in}}(a), \quad u'_{\text{out}}(a) = u'_{\text{in}}(a) \quad (26.67)$$

pozwalają wyznaczyć A i δ_0 :

$$\begin{aligned} A \sin(k'a) &= \sin(ka + \delta_0(k)), \\ Ak' \cos(k'a) &= k \cos(ka + \delta_0(k)). \end{aligned} \quad (26.68)$$

Stąd dostajemy

$$\delta_0(k) = \arctan\left(\frac{k}{k'} \tan(k'a)\right) - ka \quad (26.69)$$

Zauważmy, że dla bariery

$$k' < k. \quad (26.70)$$

Pierwsze zero funkcji u_{in} występuje dla

$$r_0 = \frac{\pi}{k'} > \tilde{r}_0 \quad (26.71)$$

gdzie \tilde{r}_0 jest pierwszym zerem rozwiązania swobodnego. Oznacza to, że krzywizna funkcji u_{in} jest mniejsza niż krzywizna rozwiązania swobodnego. Dla studni potencjału, odwrotnie

$$r_0 = \frac{\pi}{k'} < \tilde{r}_0 \quad (26.72)$$

krzywizna jest większa.

Widzimy, że w przypadku rozpraszania na sferycznej studni, można dobrać tak jej głębokość i zasięg, że $\delta_0 = \pi$ i przekrój czynny zniknie. Zjawisko to nazywa się efektem Ramsauera-Townsenda i jest obserwowalne doświadczalnie.

26.5 Stany związane a bieguny $S_l(k)$

Przypomnijmy sobie wyprowadzony już uprzednio wzór na asymptotyczną postać równania Schrödingera

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

Widzimy, że dla $l = 0$ funkcja ta jest proporcjonalna do

$$S_0(k) \frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{-ikr}}{r}, \quad (26.73)$$

gdzie

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}. \quad (26.74)$$

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

$$\frac{e^{-\varkappa r}}{r}, \quad (26.75)$$

gdzie

$$\varkappa = \sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2} E}. \quad (26.76)$$

Dla stanów związanych $E < 0$ i

$$k \rightarrow i\varkappa \quad \text{czyli} \quad \frac{e^{ikr}}{r} \rightarrow \frac{e^{-\varkappa r}}{r}. \quad (26.77)$$

Istotną różnicą między funkcjami (26.75) i (26.73) jest to, że w przypadku stanu związanego nie mamy do czynienia z analogiem fali padającej. Oznacza to, że przeprowadzając *przdlużenie analityczne* (26.77), 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 asymptocie funkcji falowej stanu związanego. Jednakże stany związane mogą istnieć tylko dla skwantowanych wartości \varkappa_n , czyli $S_0(k)$ powinno mieć bieguny dla dyskretnej wartości urojonego $k_n = i\varkappa_n$. Można pokazać, że są to bieguny proste.

26.6 Rezonanse

Zgodnie ze wzorem (26.45) spodziewamy się, że także dla sferycznej studni przekrój czynny będzie znikał w granicy małych energii $k \rightarrow 0$. Tak jest rzeczywiście, za wyjątkiem przypadku, gdy studnia ma takie parametry, że istnieje w niej stan związany o energii równej zero. Zilustrujmy to przykładem fali parcjalnej o $l = 0$, dla której mamy

$$\delta_0(k) = \arctan\left(\frac{k}{k'} \tan(k'a)\right) - ka \simeq ka \left(\frac{1}{k'a} \tan(k'a) - 1\right) \quad (26.78)$$

gdzie użyliśmy pierwszy człon rozwinięcia

$$\arctan x = x - \frac{1}{3}x^3 + \dots$$

Ponieważ interesuje nas sytuacja, kiedy

$$\frac{1}{k'a} \tan(k'a) \gg 1$$

w granicy $ka \rightarrow 0$ możemy zaniedbać człon $-ka$ w równaniu (26.78), i powrócić do pełnego równania

$$\delta_0(k) \simeq \arctan\left(\frac{k}{k'} \tan(k'a)\right). \quad (26.79)$$

Stosując wzór

$$\sin(\arctan(x)) = \frac{x}{\sqrt{1+x^2}}$$

mamy

$$\sin \delta_0(k) = \frac{ka \frac{\tan k'a}{k'a}}{\sqrt{1 + (ka)^2 \left(\frac{\tan k'a}{k'a}\right)^2}}. \quad (26.80)$$

Dla $ka \rightarrow 0$:

$$k' = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)} = \sqrt{k_0^2 - k^2} = k_0 - \frac{1}{2} \frac{k^2}{k_0} \quad (26.81)$$

gdzie

$$k_0 = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}. \quad (26.82)$$

Rozważymy teraz dwa przypadki. Jeżeli $\tan(k_0a)$ jest skończony to

$$\frac{ka \frac{\tan k'a}{k'a}}{\sqrt{1 + (ka)^2 \left(\frac{\tan k'a}{k'a}\right)^2}} \simeq ka \frac{\tan k'a}{k'a} \quad (26.83)$$

i w konsekwencji przekrój czynny dąży do stałej:

$$\sigma_0 = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0(k) = 4\pi a^2 \left(\frac{\tan k_0a}{k_0a}\right)^2. \quad (26.84)$$

Jednakże dla pewnych parametrów studni $\tan k_0a$ może być nieskończony:

$$\tan k_0a = \infty \quad \text{gdy} \quad k_0a = \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi. \quad (26.85)$$

Zauważmy, że jest to warunek na stany związane w sferycznej studni potencjału dla zerowej energii. Rzeczywiście, dla ujemnej energii $-E$

$$k' = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)} \quad \text{oraz} \quad \kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E} \quad (26.86)$$

i rozwiązania mają postać

$$u_{\text{in}} = A \sin(k'r), \quad u_{\text{out}} = e^{-\kappa r}. \quad (26.87)$$

Warunki zszycia

$$\begin{aligned} A \sin(k'a) &= e^{-\kappa a}, \\ Ak' \cos(k'a) &= -\kappa e^{-\kappa a}. \end{aligned} \quad (26.88)$$

Dzieląc stronami otrzymujemy warunek na stany związane w studni

$$\frac{\tan(k'a)}{k'a} = -\frac{1}{\kappa a}. \quad (26.89)$$

Gdy energia zmierza do zera od dołu $k' \rightarrow k_0$ oraz $\kappa \rightarrow 0$ i tangens wybucha, co oznacza, że

$$k_0 a = \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi.$$

Wróćmy teraz do wzoru na przekrój czynny i rozwińmy $\tan k'a$ wokół tego punktu:

$$\tan k'a \simeq \tan \left(k_0 a - \frac{k^2 a}{2k_0}\right) = \tan \left[\left(n + \frac{1}{2}\right) \pi - \frac{k^2 a}{2k_0}\right]. \quad (26.90)$$

Musimy zatem rozwinąć tangens wokół punktu $n + \pi/2$. Mamy

$$\sin \left(\left(n + \frac{1}{2}\right) \pi\right) = (-)^n. \quad (26.91)$$

Dalej

$$\begin{aligned} \cos \left(\frac{\pi}{2} + n\pi - \frac{k^2 a}{2k_0}\right) &= -\sin \left(n\pi - \frac{k^2 a}{2k_0}\right) \\ &= -\left[\cos(n\pi) \sin \left(-\frac{k^2 a}{2k_0}\right) + \sin(n\pi) \cos \left(-\frac{k^2 a}{2k_0}\right)\right] \\ &= (-)^n \sin \left(\frac{k^2 a}{2k_0}\right) \simeq (-)^n \frac{k^2 a}{2k_0}. \end{aligned} \quad (26.92)$$

Stąd mamy

$$ka \frac{\tan k'a}{k'a} \simeq \frac{k}{k_0} \frac{1}{\frac{k^2 a}{2k_0}} = \frac{2}{ka} \rightarrow \infty. \quad (26.93)$$

Wówczas

$$\sin^2 \delta_0(k) \simeq \frac{ka \frac{\tan k'a}{k'a}}{\sqrt{1 + (ka)^2 \left(\frac{\tan k'a}{k'a}\right)^2}} \rightarrow 1, \quad (26.94)$$

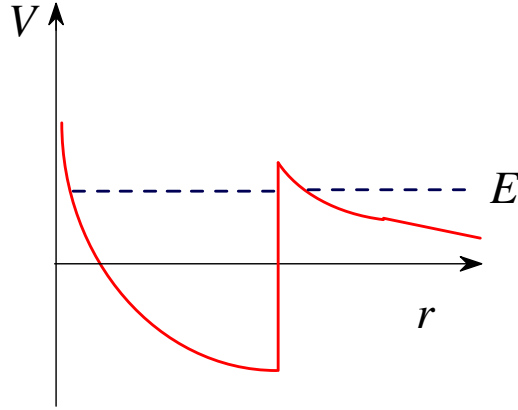
czyli osiąga maksymalną możliwą wartość.

Oznacza to, że w granicy rozpraszania przy zerowej energii przekrój czynny staje się nieskończony, jeśli studnia ma parametry, które dopuszczają stan związany o zerowej energii. W tej granicy:

$$\sigma_0 = \frac{4\pi}{k^2} \quad (26.95)$$

Dla wyższych fal parcjalnych możemy przyjąć, że w okolicy *rezonansu* (nie dla zerowej energii)

$$\delta_l(E) = \arctan \frac{\Gamma/2}{E_0 - E}. \quad (26.96)$$



Rysunek 1: Przykład rezonansu.

Jest to wzór, który modeluje fakt, że

$$\tan \delta_l(E) \rightarrow \infty \text{ gdy } E \rightarrow E_0 \quad (26.97)$$

podobnie jak było to w przypadku $\delta_0(k)$. Wówczas

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l + 1) \sin^2 \delta_l(E) = \frac{4\pi}{k^2} (2l + 1) \frac{\left(\frac{\Gamma/2}{E_0 - E}\right)^2}{1 + \left(\frac{\Gamma/2}{E_0 - E}\right)^2} = \frac{4\pi}{k^2} (2l + 1) \frac{(\Gamma/2)^2}{(E_0 - E)^2 + (\Gamma/2)^2}. \quad (26.98)$$

Jest to krzywa Breita-Wignera. Taka zależność przesunięcia fazowego od energii daje się przetłumaczyć na zależność S_l od energii

$$S_l = e^{2i\delta_l} = \frac{e^{i\delta_l}}{e^{-i\delta_l}} = \frac{\cos \delta_l + i \sin \delta_l}{\cos \delta_l - i \sin \delta_l} = \frac{1 + i \tan \delta_l}{1 - i \tan \delta_l} = \frac{E - E_0 - i\Gamma/2}{E - E_0 + i\Gamma/2}. \quad (26.99)$$

Oznacza to że funkcja $S_l(E)$ ma bieguny pod osią rzeczywistą odpowiadającą rezonansom $E = E_0 - i\Gamma/2$.

Dla dodatnich wartości rzeczywistego k mamy do czynienia z obszarem fizycznym dla rozpraszania, gdzie $\delta_0(k)$ jest rzeczywiste. W granicy $k \rightarrow 0$ wzdłuż osi rzeczywistej $\delta_0 \rightarrow 0, \pm\pi, \dots$. Tę własność można ściśle udowodnić w następujący sposób. Daleko od potencjału rozwiązanie równania (26.64)

$$u_k(r) \sim \sin(kr + \delta_0) = \sin\left(k\left(r + \frac{\delta_0}{k}\right)\right). \quad (26.100)$$

Z kolei równanie (26.64) dla $k = 0$ ma proste rozwiązanie

$$u_0(r) = \text{const.}(r - a) \quad (26.101)$$

czyli linię prostą! Aby zobaczyć jak otrzymać z (26.100) linię prosta w granicy $k \rightarrow 0$ rozważmy stosunek

$$\frac{u'_0}{u_0} = \frac{1}{r-a} = \lim_{k \rightarrow 0} k \cot \left(k \left(r + \frac{\delta_0}{k} \right) \right). \quad (26.102)$$

Podstawiając $r = 0$ (nawet jeśli dla $r = 0$ nie jest to prawdziwa funkcja falowa) dostajemy

$$\lim_{k \rightarrow 0} k \cot(\delta_0(k)) = -\frac{1}{a}, \quad (26.103)$$

gdzie jawnie zaznaczyliśmy, że przesunięcie fazowe zależy od energii. Naturalnym rozwiązaniem tego równania

$$\lim_{k \rightarrow 0} \frac{\cos(\delta_0(k))}{\frac{\sin(\delta_0(k))}{-ka}} = 1 \quad (26.104)$$

jest

$$\delta_0(k) = -ka \pm n\pi. \quad (26.105)$$

Rzeczywiście, korzystając z równania (26.92)

$$\sin(\pm n\pi - x) \xrightarrow{x \rightarrow 0} -(-)^n x$$

oraz

$$\cos(\pm n\pi + x) \xrightarrow{x \rightarrow 0} (-)^n$$

mamy

$$\lim_{k \rightarrow 0} \frac{\cos(-ka \pm n\pi)}{\frac{\sin(-ka \pm n\pi)}{-ka}} = \frac{(-)^n}{\frac{-(-)^n ka}{-ka}} = 1.$$

Podsumowując

$$\lim_{k \rightarrow 0} S_0(k) = \lim_{k \rightarrow 0} e^{i2\delta_0(k)} = 1. \quad (26.106)$$

Widzimy zatem, że $S_0(k)$ ma następujące własności:

1. bieguny w $k = i\kappa_n$;
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 $S_0(\infty) = 1$.