22 Rozpraszanie, przybliżenie Borna

22.1 Rozpraszanie w jednym wymiarze

W nierelatywistycznej mechanice kwantowej rozpraszanie rozumiemy jako proces zmiany funkcji falowej opisującej rozpraszany obiekt 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 mechanice kwantowej.

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 zlokalizoawny 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 $x = 0$ funkcje falowe dla $x \ll 0$ lub $x \gg 0$ opisywane są przez fale płaskie. Funkcja falowa cząstki padającej (z lewa na prawo)

$$\Psi_p(x) = A\, e^{-iEt/\hbar} e^{+ikx} \text{ dla } x \ll 0 \tag{22.1}$$

Funkcja falowa stanu końcowego: odbicie i przejście przez potencjał

$$\begin{aligned} \Psi_k(x) &= B\, e^{-iEt/\hbar} e^{-ikx} \text{ dla } x \ll 0 \\ &+ C\, e^{-iEt/\hbar} e^{+ikx} \text{ dla } x \gg 0. \end{aligned} \tag{22.2}$$

W podejściu stacjonarnym musimy zatem rozwiązać równanie Schrödingera z warunkami brzegowymi

$$\begin{aligned} \psi(x) &= A\, e^{+ikx} + B\, e^{-ikx} \text{ dla } x \ll 0 \\ \psi(x) &= C\, e^{+ikx} \text{ dla } x \gg 0. \end{aligned} \tag{22.3}$$

Zauważmy, że energia jest tu zachowana, nie zostaje ona przekazana „tarczy”, stąd to samo k we wszystich kawałkach funkcji falowej.

Warunki (22.3) potraktujemy jako warunki brzegowe dla równania Schrödingera opisujące cząstkę o masie m o dodatniej energii

$$E = \frac{k^2}{2m\hbar^2}, \tag{22.4}$$

które wygodnie zapisać w postaci (w dowolnej liczbie wymiarów):

$$\left(\nabla^2 + k^2\right) \psi(\vec{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} V(\vec{r}) \psi(\vec{r}). \tag{22.5}$$

Sens fizyczny współczynników A, B i C można odczytać rozważając gęstość prądu $S(x)$ z równania ciągłości

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial S}{\partial x} = 0 \tag{22.6}$$

$$S(x) = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^*(x)\frac{\partial\psi(x)}{\partial x} - \psi(x)\frac{\partial\psi^*(x)}{\partial x}\right) \tag{22.7}$$

dla $x \ll 0$

$$S(x) = -\frac{i\hbar}{2m}\left(|A|^2 ik - |B|^2 ik\right) = \frac{p}{2m}\left(|A|^2 - |B|^2\right) = v\left(|A|^2 - |B|^2\right) \tag{22.8}$$

i dla $x \gg 0$

$$S(x) = v\,|C|^2\,, \tag{22.9}$$

gdzie v jest prędkością cząstki. Interpretacji poddają się jedynie stosunki

$$\left|\frac{B}{A}\right|^2, \left|\frac{C}{A}\right|^2 \tag{22.10}$$

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

Przejście nad potencjałem i tunelowanie.

22.2 Rozpraszanie w 3 wymiarach

W trzech wymiarach na ogół trudno rozwiązać jest równanie (22.5) dokładnie, pozatem traci sens pojęcie „za" i „przed" potencjałem. Dlatego 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:

$$u_i(\vec{r}) = e^{i\vec{k}_i\vec{r}}, \qquad u_f(\vec{r}) = e^{i\vec{k}_f\vec{r}}. \tag{22.11}$$

Warto zauważyć, że o ile kierunek pędu cząstki padającej możemy wybrać np. jako kierunek osi z, to kierunek cząstki rozproszonej, czyli $\vec{k}_f$, może być dowolny. W przypadku jednowymarowym mieliśmy $k_f = \pm k_i = \pm k$. Gęstość strumienia cząstek padających jest w przypadku trójwymiarowym wektorem i wynosi

$$\vec{S}_i = -\frac{i\hbar}{2m}\left(u_i^*(x)\vec{\nabla}u_i(x) - u_i(x)\vec{\nabla}u_i^*(x)\right) = \frac{\hbar}{m}\vec{k}_i. \tag{22.12}$$

Zauważmy, że za funkcję u_i przyjęliśmy *nieznormalizowaną* falę płaską (22.11). Składowe wektora $\vec{S}_i$ mają podobnie jak w przypadku jednowymiarowym wymiar prędkości, czyli liczby padających cząstek na jednostkę czasu.

Równanie Schrödingera

$$\left(\nabla^2 + k^2\right)\psi(\vec{r}) = \frac{2m}{\hbar^2}V(\vec{r})\psi(\vec{r})$$

zamienimy w równanie całkowe i będziemy go rozwiązywać iteracyjnie. Warto tu zauważyć, że (22.5) można potraktować jako niejednorodne równanie różniczkowe drugiego rzędu, gdzie członem źródłowym jest

$$j(\vec{r}) = \frac{2m}{\hbar^2}V(\vec{r})\psi(\vec{r}). \tag{22.13}$$

Takie potraktowanie równania (22.5) jest w pewnym sensie niestandardowe, gdyż na ogół źródłem jest znana, zadana funkcja, a nie funkcja zawierająca funkcję poszukiwaną (w tym wypadku ψ).

22.2.1 Funkcja Greena

Rozwiązanie niejednorodnego równania typu

$$\left(\nabla_r^2 + k^2\right)\psi(\vec{r}) = j(\vec{r}) \tag{22.14}$$

znajdujemy konstruując funkcję Greena zdefiniowaną jako

$$\left(\nabla_r^2 + k^2\right) G(\vec{r}, \vec{r}') = \delta^{(3)}\left(\vec{r} - \vec{r}'\right). \tag{22.15}$$

Wówczas

$$\psi(\vec{r}) = u_i(\vec{r}) + \int d^3r' G(\vec{r}, \vec{r}') j(\vec{r}'), \tag{22.16}$$

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

$$\begin{aligned}
\delta^{(3)}\left(\vec{r} - \vec{r}'\right) &= \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} e^{i\vec{q}(\vec{r}-\vec{r}')}, \\
G(\vec{r} - \vec{r}') &= \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} e^{i\vec{q}(\vec{r}-\vec{r}')} \tilde{G}(\vec{q}),
\end{aligned} \tag{22.17}$$

Podstawiając (22.17) równania do obu stron równania (22.15) otrzymujemy

$$\tilde{G}(\vec{q}) = \frac{1}{k^2 - q^2}. \tag{22.18}$$

Widzimy zatem, że po pierwsze funkcja Greena $\tilde{G}$ nie zależy od kierunku, a po drugie, że możemy mieć kłopoty z drugą transformatą Fouriera (22.17), żeby wyliczyć G. Rzeczywiście

$$G(\vec{x}) = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} e^{i\vec{q}\vec{x}} \frac{1}{k^2 - q^2} \tag{22.19}$$

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

$$\begin{aligned}
G(\vec{x}) &= \int_0^\infty \frac{q^2 dq}{(2\pi)^3} \frac{1}{k^2 - q^2} \int_0^\pi d\varphi \int_{-1}^{1} d\cos\theta \, e^{iqx\cos\theta} \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{1}{ix} \int_0^\infty \frac{q dq}{k^2 - q^2} \left(e^{iqx} - e^{-iqx}\right).
\end{aligned} \tag{22.20}$$

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

$$G(x) = \frac{i}{(2\pi)^2 x} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{q dq}{(q-k)(q+k)} e^{iqx}, \tag{22.21}$$

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

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

$$G_+(x) = -\frac{1}{4\pi x} e^{ikx}, \tag{22.22}$$

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

$$G_-(x) = -\frac{1}{4\pi x} e^{-ikx}, \tag{22.23}$$

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

$$G(x) = \frac{1}{2} G_+(x) + \frac{1}{2} G_-(x). \tag{22.24}$$

  Wybraliśmy tu czynnik $1/2$ aby spełnione było równanie (22.15).

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

$$\begin{aligned} x &= |\vec{r} - \vec{r}'| = \sqrt{r^2 + r'^2 - 2rr' \cos\theta} \\ &\simeq r\sqrt{1 - 2\frac{r'}{r}\cos\theta} \simeq r - r' \cos\theta \end{aligned} \tag{22.25}$$

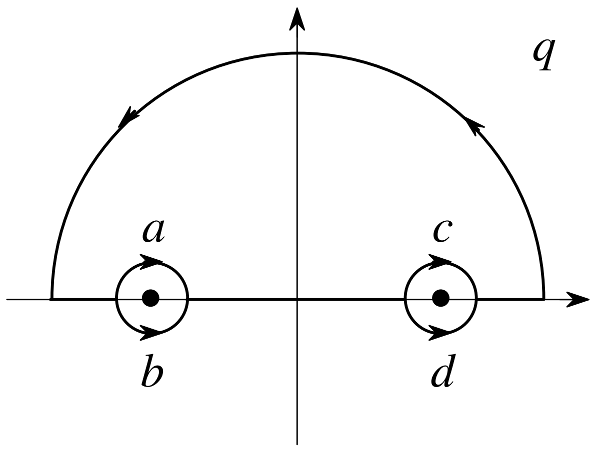
i dalej

$$kx \simeq kr - \vec{k}_f \vec{r}', \tag{22.26}$$

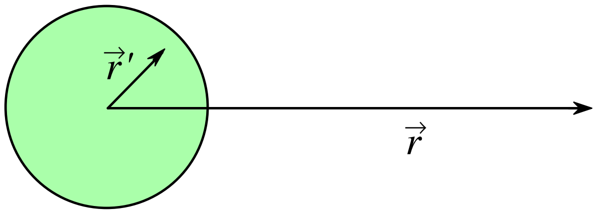
gdzie

$$\vec{k}_f = k\frac{\vec{r}}{r} \tag{22.27}$$

jest wektorem skierowanym wzdłuż promienia $\vec{r}$ o module równym k (zachowanie energii!). Zatem, jeśli we wzorze (22.16) 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 opisania rozproszenia za G musimy przyjąć G_+.



Rysunek 1: Osobliwości w płaszczyźnie zespolonego q.



Rysunek 2: Przybliżenie dużych odległości.

22.2.2 Amplituda rozpraszania

Podstawiając do (22.16) G_+ i j dane równaniem (22.13) otrzymujemy:

$$\psi(\vec{r}) = u_i(\vec{r}) - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} V(\vec{r}')\psi(\vec{r}'). \tag{22.28}$$

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

$$V \to \lambda V \tag{22.29}$$

i rozwijając

$$\psi = \psi^{(0)} + \lambda\psi^{(1)} + \lambda^2\psi^{(2)} + \dots \tag{22.30}$$

Otrzymujemy wówczas rekurencję

$$\begin{aligned} \psi^{(0)}(\vec{r}) &= u_i(\vec{r}), \\ \psi^{(n)}(\vec{r}) &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} V(\vec{r}')\psi^{(n-1)}(\vec{r}') \end{aligned} \tag{22.31}$$

co daje

$$
\begin{aligned}
\psi^{(1)}(\vec{r}) &= -\frac{m}{\pi\hbar^2}\int d^3r'\frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|}V(\vec{r}')u_i(\vec{r}') \\
\psi^{(2)}(\vec{r}) &= \left(\frac{m}{\pi\hbar^2}\right)^2\int d^3r'\frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|}V(\vec{r}')\int d^3r''\frac{e^{ik|\vec{r}'-\vec{r}''|}}{|\vec{r}'-\vec{r}''|}V(\vec{r}'')u_i(\vec{r}'') \qquad (22.32)
\end{aligned}
$$

i tak dalej. Zauważmy, że dla $r \gg r'$ i dla zlokalizowanych potencjałów możemy użyć przybliżenia (22.25) i (22.26) pod pierwszą całką po dr':

$$
\begin{aligned}
\psi^{(1)}(\vec{r}) &= -\frac{m}{\pi\hbar^2}\int d^3r' e^{-i\vec{k}_f\,\vec{r}'}V(\vec{r}')u_i(\vec{r}') \times \frac{e^{ikr}}{r} \qquad (22.33) \\
\psi^{(2)}(\vec{r}) &= \left(\frac{m}{\pi\hbar^2}\right)^2\int d^3r' e^{-i\vec{k}_f\,\vec{r}'}V(\vec{r}')\int d^3r''\frac{e^{ik|\vec{r}'-\vec{r}''|}}{|\vec{r}'-\vec{r}''|}V(\vec{r}'')u_i(\vec{r}'') \times \frac{e^{ikr}}{r}.
\end{aligned}
$$

Wzór (22.33) ma bardzo prostą interpretację fizyczną: kolejne przybliżenia odpowiadają kolejnym rozproszeniom na potencjale V przeplatanym propagacją swobodną opisaną funkcją Greena (22.22).

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

$$
\psi(\vec{r}) = u_i(\vec{r}) + A_{fi} \times \frac{e^{ikr}}{r}, \qquad (22.34)
$$

gdzie

$$
A_{fi} = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d^3r' u_f^*(\vec{r}')V(\vec{r}')\psi(\vec{r}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\left\langle u_f \left| V \right| \psi \right\rangle \qquad (22.35)
$$

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 $\vec{k}_f$). Podstawiając za ψ_i kolejne przybliżenia (22.33) otrzymujemy kolejne przybliżenia dla amplitudy rozpraszania. W pierwszym rzędzie dostajemy tzw. *przybliżenie Borna*:

$$
\begin{aligned}
A_{fi} &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d^3r' u_f^*(\vec{r}')V(\vec{r}')u_i(\vec{r}') \\
&= -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d^3r' e^{-i(\vec{k}_f-\vec{k}_i)\,\vec{r}'}V(\vec{r}'). \qquad (22.36)
\end{aligned}
$$

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