23 Rozpraszanie, przykłady, własności analityczne

23.1 Rozpraszanie na sztywnej kuli

Wróćmy do równania Schrödingera dla $E = \hbar^2 k^2/2m$

$$\frac{d^2}{dr^2}R_{kl} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}R_{kl} + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2m}{\hbar^2}V(r)\right)R_{kl} = 0. \tag{23.1}$$

Pokazaliśmy, że dla rozwiązania bez potencjału jego rozwiązania $R_{kl} = r^l \chi_{kl}$ są proporcjonalne do

$$\chi_{kl} = \left(\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\right)^l \chi_{k0}, \tag{23.2}$$

gdzie

$$\frac{d^2}{dr^2}(r\chi_{k0}) + k^2(r\chi_{k0}) = 0. \tag{23.3}$$

Równanie to ma dwa rozwiązania

$$\chi_{k0} = \frac{\sin kr}{r} \quad \text{lub} \quad \frac{\cos kr}{r}. \tag{23.4}$$

Dla rozwiązań bez potencjału drugie z tych rozwiązań odrzuciliśmy, gdyż jest ono nieskończone w $r = 0$. Jednakże dla potencjału sztywnej kuli

$$V(r) = \begin{cases} \infty & \text{dla} \quad r < a \\ 0 & \text{dla} \quad r \geq a \end{cases}. \tag{23.5}$$

funkcja falowa znika tożsamościowo dla $r < a$, a dla $r \geq a$ pełne rozwiązanie będzie kombinacją liniową obu rozwiązań (24.4) i podobnie dla wyższych l.

Równanie (24.1) dla $z = kr$ i $V(r) = 0$ przyjmuje postać znanego w matematyce *sferycznego równania Bessela*:

$$z^2 w''(z) + 2zw'(z) + (z^2 - l(l+1))w(z) = 0. \tag{23.6}$$

Jego dwa linowo niezależne rozwiązania dla $l = 0$ to

$$j_0(z) = \frac{\sin z}{z} \quad \text{oraz} \quad y_0(z) = -\frac{\cos z}{z}. \tag{23.7}$$

Dla $l > 0$ stosujemy znane już wzory

$$\begin{aligned} j_l(z) &= z^l\left(-\frac{1}{z}\frac{d}{dz}\right)^l \frac{\sin z}{z}, \\ y_l(z) &= -z^l\left(-\frac{1}{z}\frac{d}{dz}\right)^l \frac{\cos z}{z}, \end{aligned} \tag{23.8}$$

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

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

Ze wzorów Rayleigha'a wynika asymptotyka sferycznych funkcji Bessela dla $z \to \infty$:

$$j_l(z) \to \frac{\sin(z - l\pi/2)}{z}, \quad y_l(z) \to -\frac{\cos(z - l\pi/2)}{z} \quad \text{dla} \quad z \to \infty \tag{23.9}$$

Z kolei dla $z \to 0$ mamy

$$j_l(z) \to \frac{z^l}{(2l+1)!!}, \qquad y_l(z) \to -\frac{(2l-1)!!}{z^{(l+1)}} \qquad \text{dla} \quad z \to 0. \tag{23.10}$$

Wracając do rozpraszania na sztywnej kuli mamy

$$R_{kl}(r) = A_l\, j_l(kr) + B_l\, y_l(kr) \tag{23.11}$$

z warunkiem brzegowym

$$R_{kl}(a) = 0. \tag{23.12}$$

Dla $l = 0$ warunek ten ma postać

$$A_0 \sin ka - B_0 \cos ka = 0. \tag{23.13}$$

Przyjmując $A_0 = \cos ka$ (pamiętajmy, że funkcję $R_{k0}(r)$ możemy z tego warunku wyznaczyć tylko z dokładnością do normalizacji) dostajemy że $B_0 = \sin ka$. Mamy więc

$$R_{k0}(r) = \mathcal{N}\left(\cos ka\, \sin kr - \sin ka\, \cos kr\right)\frac{1}{r} = \mathcal{N}\frac{\sin(k(r-a))}{r} \tag{23.14}$$

w zgodzie z poprzednimi rozważaniami.

Dla $l > 0$ sytuacja nie jest już tak prosta. Z warunku (24.12) dostajemy

$$\frac{B_l}{A_l} = -\frac{j_l(ka)}{y_l(ka)}. \tag{23.15}$$

Aby wyliczyć przesunięcie fazowe $\delta_l(k)$, zastosujemy we wzorze (24.11) rozwinięcie asymptotyczne (24.9) dla $r \to \infty$:

$$R_{kl}(r) \to \frac{\sqrt{A_l^2 + B_l^2}}{kr}\left(\frac{A_l}{\sqrt{A_l^2 + B_l^2}}\sin(kr - l\pi/2) - \frac{B_l}{\sqrt{A_l^2 + B_l^2}}\cos(kr - l\pi/2)\right). \tag{23.16}$$

Oznaczając

$$\frac{A_l}{\sqrt{A_l^2+B_l^2}} = \cos\delta_l(k), \qquad -\frac{B_l}{\sqrt{A_l^2+B_l^2}} = \sin\delta_l(k), \tag{23.17}$$

gdzie

$$\tan\delta_l(k) = -\frac{B_l}{A_l} = \frac{j_l(ka)}{y_l(ka)} \tag{23.18}$$

otrzymujemy

$$R_{kl}(r) \to \frac{\sqrt{A_l^2+B_l^2}}{kr}\sin\left(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l(k)\right). \tag{23.19}$$

Równanie (24.18) łatwo rozwiązać dla $l = 0$:

$$\delta_0(k) = \arctan\left(-\frac{j_0(ka)}{y_0(ka)}\right) = \arctan\left(\tan(-ka)\right) = -ka \tag{23.20}$$

jak poprzednio. 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 dołladnością do π.

Na koniec rozważmy rozpraszanie na sztywnej kuli w granicy małych energii $k \to 0$. Wówczas możemy do wyliczenia ilorazu (24.18) zastosować rozwinięcie (24.10)

$$\tan\delta_l(k) \to \delta_l(k)$$
$$\frac{j_l(ka)}{y_l(ka)} \to -(ka)^{2l+1}$$

czyli

$$\delta_l(k) \sim -(ka)^{2l+1}. \tag{23.21}$$

Ponieważ dla małych k zachodzi $ka << 1$, główny wkład do przekroju czynnego daje fala s, podczas gdy inne fale są tłumione. Stwierdzenie to jest prawdziwe dla potencjałów innych niż sztywna kula, przy czym a jest miarą zasięgu potancjału. Wówczas

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l(k) \simeq \frac{4\pi}{k^2}\delta_0^2(k) \simeq 4\pi a^2. \tag{23.22}$$

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

23.2 Rozpraszanie na barierze lub skończonej studni

Rozważmy rozpraszanie na potencjale

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

gdzie $V_0 > 0$ jest miarą wysokości (głebokości potencjału), zaś a jego zasięgiem. Aby ułatwić sobie dyskusję, rozważymy rozpraszanie przy małych energiach, gdy $k \to 0$, tak że dominujący wkład do przwkroju czynnego wnosi fala s. Na zewnątrz studni funkcja $u_k(r) = rR_{k0}(r)$ spełnia znane nam równanie (24.3)

$$\frac{d^2}{dr^2}u_k + k^2 u_k = 0. \tag{23.23}$$

Rozwiązanie tego równania zapiszmy jako

$$u_{\text{out}}(r) = A\sin(kr + \delta_0) \tag{23.24}$$

Wewnątrz bariery (studni) mamy to samo równanie z

$$k \to k' = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E \mp V_0)}. \tag{23.25}$$

Rozwiązaniem spełniającym warunek brzegowy w $r = 0$ jest

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

ze stała normalizacyjną równą 1. Aby otrzymać pełne rozwiązanie musimi w $r = 0$ zszyć funkcje u_{out} i u_{in} oraz ich pochodne, a następnie dobrać stała normalizacyjną pełnego rozwiązania. Dwa warunki

$$u_{\text{out}}(a) = u_{\text{in}}(a), \quad u'_{\text{out}}(a) = u'_{\text{in}}(a) \tag{23.26}$$

pozwalają wyznaczyć A i δ_0.

Jeżeli $E - V_0 < 0$ to rozwiązaniem jest eksponenta.

Zauważmy, że dla bariery

$$k' < k. \tag{23.27}$$

Pierwsze zero funkcji u_{in} występuje dla

$$r_0 = \frac{\pi}{k'} > \tilde{r}_0 \tag{23.28}$$

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

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.

23.3 Stany związane a bieguny $S_l(k)$

Przypomnijmy sobie wyprowadzony już uprzednio wzór na asymptotyczną poztać równania Schrödingera

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

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

$$S_0(k)\frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{-ikr}}{r}, \tag{23.29}$$

gdzie

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E}. \tag{23.30}$$

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

$$\frac{e^{-\varkappa r}}{r}, \tag{23.31}$$

gdzie

$$\varkappa = \sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2}E}. \tag{23.32}$$

Dla stanów związanych $E < 0$ i

$$k \to i\varkappa \quad \text{czyli} \quad \frac{e^{ikr}}{r} \to \frac{e^{-\varkappa r}}{r}. \tag{23.33}$$

Istotną różnicą między funkcjami (24.31) i (24.29) jest to, że w przypadku stanu związanego nie mamy do czynienia z analogiem fali padającej. Oznacza to, że przeprowadzając *przdłużenie analityczne* (24.33), 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 asymptotyce funkcji walowej stanu związanego. Jednakże stany związane mogą istnieć tylko dla skwantowanych wartości $\varkappa_n$, czyli $S_0(k)$ powinno mieć bieguny dla dyskretnych wartości urojonego $k_n = i\varkappa_n$. Można pokazać, że są to bieguny proste.

Dla dodatnich wartości rzeczywistego k mamy do czynienia z obszrem fizycznym dla rozpraszania, gdzie $\delta_0(k)$ jest rzeczywiste. W granicy $k \to 0$ wzdłuż osi rzeczywistej $\delta_0 \to 0, \pm\pi, \ldots$. Tę własność można ściśle udowodnić w następujący sposób. Daleko od potencjału rozwiązanie równania (24.23)

$$u_k(r) \sim \sin(kr + \delta_0) = \sin\left(k\left(r + \frac{\delta_0}{k}\right)\right). \tag{23.34}$$

Z kolei równanie to dla $k = 0$ ma proste rozwiązanie

$$u_0(r) = \text{const.}(r - a) \tag{23.35}$$

czyli linię prostą! Aby zobaczyć jak otrzymać z (24.34) linię prosta w granicy $k \to 0$ rozważmy stosunek

$$\frac{u_0'}{u_0} = \frac{1}{r-a} = \lim_{k\to 0} k \cot\left(k\left(r + \frac{\delta_0}{k}\right)\right). \tag{23.36}$$

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

$$\lim_{k\to 0} k \cot\left(\delta_0(k)\right) = -\frac{1}{a}, \tag{23.37}$$

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

$$\lim_{k\to 0} \frac{\cos\left(\delta_0(k)\right)}{\frac{\sin(\delta_0(k))}{-ka}} = 1 \tag{23.38}$$

jest

$$\delta_0(k) = -ka \pm n\pi. \tag{23.39}$$

Podsumowując

$$\lim_{k\to 0} S_0(k) = \lim_{k\to 0} e^{i2\delta_0(k)} = 1. \tag{23.40}$$

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

1. bieguny w $k = i\varkappa_n$;
2. $|S_0(k)| = 1$ dla rzeczywistoych $k > 0$ (unitarność);
3. $S_0(0) = 1$ (zachowanie progowe).
   Na ogół mamy też $S_0(\infty) = 1$.