

Kapitola 19

Základy teorie rozptylu

Přehled teorie

Úvod

V této kapitole si ukážeme základy teorie rozptylu v kvantové mechanice. Zaměříme se na pružný rozptyl bezspinové částice na potenciálu $V(\vec{x})$, který má buď konečný dosah R (tj. $V(\vec{x}) = 0$ pro $|\vec{x}| > R$), nebo vymizí pro $|\vec{x}| \rightarrow \infty$ dostatečně rychle (rychleji než $\frac{1}{r}$). V takovém případě lze počáteční stav $|\psi_i\rangle$ rozptylované částice v čase $t_0 \rightarrow -\infty$ volit jako (zobecněný) vlastní stav volné částice (s hamiltoniánem $\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2M}$) s hybností \vec{p} a energií $E = \frac{p^2}{2M}$, tj. rovinnou vlnu $|\vec{p}\rangle$. Souřadnou soustavu zvolíme tak, že částice budou dopadat ve směru osy z , tj. $\vec{p} = (0, 0, p)$. Označíme vlnový vektor dopadající částice

$$\vec{k} = \frac{1}{\hbar}\vec{p} = (0, 0, \frac{p}{\hbar}) = (0, 0, k).$$

Stavu dopadající částice $|\vec{p}\rangle \equiv |\psi_{\vec{k}}\rangle$ odpovídá v x -reprezentaci vlnová funkce

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \psi_{\vec{k}} \rangle = e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} e^{ikz}.$$

Zajímá nás pravděpodobnost, že v čase $t_f \rightarrow +\infty$ nalezneme rozptýlenou částici ve stavu vlastním stavu volné částice s hybností $\vec{p}' \neq \vec{p}$ (neumíme rozeznat částici rozptýlenou $\vec{p} \rightarrow \vec{p}'$ od částice, která projde potenciálem beze změny), tj. ve stavu $|\vec{p}'\rangle \equiv |\psi_{\vec{k}'}\rangle$ s vlnovou funkcí

$$\psi_{\vec{k}'}(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \psi_{\vec{k}'} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} e^{i\vec{k}'\cdot\vec{x}},$$

kde $\vec{k}' = \frac{1}{\hbar}\vec{p}'$. Pro pružný rozptyl platí $p = p'$, tj. $k = k'$. Amplituda pravděpodobnosti rozptylu $\vec{p} \rightarrow \vec{p}'$ bude rovna

$$\begin{aligned} w_{\vec{p} \rightarrow \vec{p}'} &= \lim_{\substack{t_0 \rightarrow -\infty \\ t_f \rightarrow +\infty}} \langle \vec{p}' | \hat{U}_0^\dagger(t_f, 0) \hat{U}(t_f, t_0) \hat{U}_0(0, t_0) | \vec{p} \rangle \\ &= \lim_{\substack{t_0 \rightarrow -\infty \\ t_f \rightarrow +\infty}} \langle \vec{p}' | \hat{S}(t_f, t_0) | \vec{p} \rangle = \langle \vec{p}' | \hat{S} | \vec{p} \rangle = S_{\vec{p}', \vec{p}}, \end{aligned}$$

kde $\hat{S}(t_f, t_0)$ je evoluční operátor v Diracově obraze a \hat{S} je operátor S -matice

$$\hat{S} = \lim_{\substack{t_0 \rightarrow -\infty \\ t_f \rightarrow +\infty}} \hat{S}(t_f, t_0).$$

Jedna z možností, jak amplitudu najít, je použít nestacionární poruchovou teorii. Tento postup je uveden v poznámkách k přednášce. Ukážeme si zde jiný postup, který je podobný řešení rozptylu na přímce (viz. zimní semestr). Díky limitám totiž není nutné řešit nestacionární úlohu. Stačí najít řešení $\phi_{\vec{k}}$ bezčasové Schrödingerovy rovnice pro úplný hamiltonián

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta + V(\vec{x}),$$

se stejnou energií, jako má dopadající částice, tj.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta + V(\vec{x}) \right) \phi_{\vec{k}}(\vec{x}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2M} \phi_{\vec{k}}(\vec{x}), \quad (19.1)$$

kteou lze v asymptotické oblasti ($r = |\vec{x}| \rightarrow +\infty$) napsat jako superpozici dopadající rovinné vlny a rozptýlené sférické vlny

$$\phi_{\vec{k}}(\vec{x}) \sim \psi_{\vec{k}}(\vec{x}) + \psi_{sc}(\vec{x}) \sim e^{ikz} + f(\vec{k}', \vec{k}) \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (19.2)$$

$\phi_{\vec{k}}(\vec{x})$ je tzv. stacionární rozptylový stav. Funkce $f(\vec{k}', \vec{k})$ se nazývá amplituda rozptylu, lze ji též zapsat ve tvaru

$$f(\vec{k}', \vec{k}) \equiv f_k(\theta, \varphi),$$

kde θ a φ jsou prostorové úhly vektoru \vec{k}' (\vec{k} míří ve směru osy z). Amplituda $f_k(\theta, \varphi)$ obsahuje veškeré informace o rozptylu dopadající rovinné vlny na potenciálu $V(\vec{x})$ pod různými úhly. Ukážeme, že pro diferenciální účinný průřez platí

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_k = |f_k(\theta, \varphi)|^2.$$

Diferenciální účinný průřez

Ze stacionárního rozptylového stavu můžeme vyjádřit tok pravděpodobnosti (za jednotku času) dopadající a rozptýlené vlny. Připomeňme, že pro vlnovou funkci $\psi(\vec{x}, t)$ se definuje tok pravděpodobnosti jako

$$\vec{j}(\vec{x}, t) = \frac{i\hbar}{2M} \left(\psi \vec{\nabla} \bar{\psi} - \bar{\psi} \vec{\nabla} \psi \right),$$

a spolu s hustotou pravděpodobnosti $\rho(\vec{x}, t) = |\psi(\vec{x}, t)|^2$ splňuje rovnici kontinuity

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0,$$

kteřá představuje zachování normy vektoru během časového vývoje uzavřeného kvantového systému. Pro stacionární stav je tok na čase nezávislý. Tok dopadající vlny $\psi_{\vec{k}}(\vec{x}) \sim e^{ikz}$ je

$$\vec{j}_{in} = \frac{\hbar k}{M} \vec{n}_z,$$

kde \vec{n}_z je jednotkový vektor ve směru osy z . Rozptýlenou vlnu máme zapsanou ve sférických souřadnicích

$$\psi_{sc}(r, \theta, \varphi) \sim f_k(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r}.$$

Pro výpočet toku tedy použijeme gradient ve sférických souřadnicích

$$\vec{\nabla} = \frac{\partial}{\partial r} \vec{n}_r + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \vec{n}_\theta + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \vec{n}_\varphi,$$

kde \vec{n}_r , \vec{n}_θ a \vec{n}_φ jsou jednotkové vektory ve směrech r , θ a φ . Gradient ψ_{sc} je tedy

$$\vec{\nabla} \psi_{sc}(r, \theta, \varphi) = \left(\left(ik - \frac{1}{r} \right) f_k \vec{n}_r + \frac{1}{r} \frac{\partial f_k}{\partial \theta} \vec{n}_\theta + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial f_k}{\partial \varphi} \vec{n}_\varphi \right) \frac{e^{ikr}}{r}$$

Tok rozptýlené vlny je potom

$$\vec{j}_{sc} = \frac{\hbar k}{M} \frac{1}{r^2} |f_k|^2 \vec{n}_r + \frac{i\hbar}{2M} \frac{1}{r^3} \left(f_k \frac{\partial \bar{f}_k}{\partial \theta} - \bar{f}_k \frac{\partial f_k}{\partial \theta} \right) \vec{n}_\theta + \frac{i\hbar}{2M} \frac{1}{r^3 \sin \theta} \left(f_k \frac{\partial \bar{f}_k}{\partial \varphi} - \bar{f}_k \frac{\partial f_k}{\partial \varphi} \right) \vec{n}_\varphi.$$

Pro velká r je tok ve směrech θ a φ mnohem menší než ve směru r , takže přibližně platí

$$\vec{j}_{sc} \sim \frac{\hbar k}{M} \frac{1}{r^2} |f_k|^2 \vec{n}_r,$$

tj. tok rozptýlené vlny je prakticky radiální. Diferenciální účinný průřez $d\sigma(\theta, \varphi)$ lze vyjádřit jako podíl velikosti toku pravděpodobnosti rozptýlené vlny infinitezimální plochou $dS = r^2 d\Omega$ ku velikosti toku dopadající vlny

$$d\sigma(\theta, \varphi) = \frac{|\vec{j}_{sc}| dS}{|\vec{j}_{in}|} = |f_k(\theta, \varphi)|^2 d\Omega,$$

tj. skutečně platí

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_k = |f_k(\theta, \varphi)|^2.$$

Stacionární rozptylový stav, Lippmann-Schwingerova rovnice

Stacionární rozptylový stav $\phi_{\vec{k}}$ je řešením bezčasové Schrödingerovy rovnice pro celkový hamiltonián (19.1). Označíme

$$U(\vec{x}) = \frac{2M}{\hbar^2} V(\vec{x}),$$

rovnici (19.1) pak upravíme do tvaru

$$(\Delta + k^2)\phi_{\vec{k}}(\vec{x}) = U(\vec{x})\phi_{\vec{k}}(\vec{x}).$$

Tato diferenciální rovnice je ekvivalentní integrální Lippmann-Schwingerově rovnici

$$\phi_{\vec{k}}(\vec{x}) = \psi_{\vec{k}}(\vec{x}) + \int_{\mathbb{R}^3} G_{\vec{k}}(\vec{x} - \vec{x}') U(\vec{x}') \phi_{\vec{k}}(\vec{x}') d^3 x', \quad (19.3)$$

kde $G_{\vec{k}}(\vec{x})$ je Greenova funkce (resp. fundamentální řešení) bezčasové Schrödingerovy rovnice volné částice

$$(\Delta + k^2)G_{\vec{k}}(\vec{x}) = \delta(\vec{x}). \quad (19.4)$$

Greenovu funkci a delta funkci vyjádříme pomocí Fourierovy transformace

$$G_{\vec{k}}(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} e^{i\vec{q}\cdot\vec{x}} \tilde{G}_{\vec{k}}(\vec{q}) d^3 q,$$

$$\delta(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} e^{i\vec{q}\cdot\vec{x}} d^3 q.$$

Dosazením do (19.4) dostaneme algebraickou rovnici pro Fourierovu transformaci Greenovy funkce

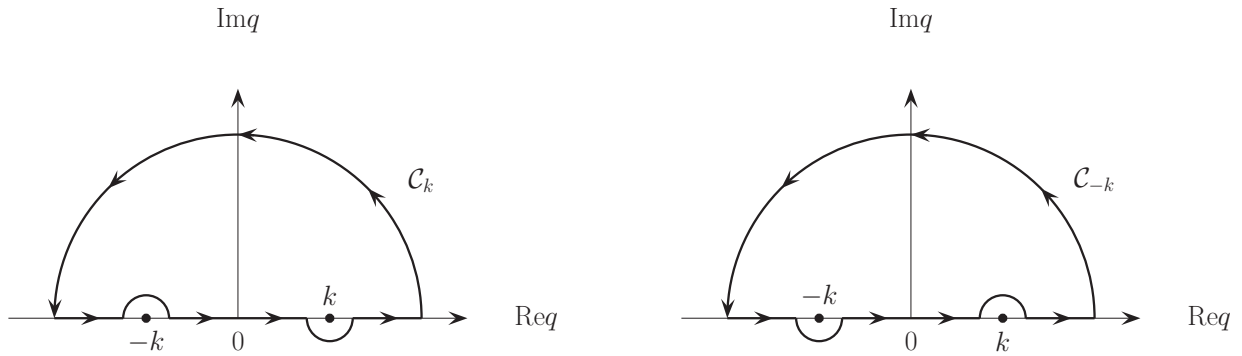
$$(-q^2 + k^2)\tilde{G}_{\vec{k}}(\vec{q}) = 1,$$

její řešení je

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

Greenova funkce $G_{\vec{k}}(\vec{x})$ je tedy dána vztahem

$$G_{\vec{k}}(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} e^{i\vec{q}\cdot\vec{x}} \frac{1}{k^2 - q^2} d^3 q.$$



Obrázek 19.1: Křivky pro póly v $q = k$ a $q = -k$.

Integrál převedeme do sférických souřadnic a vyintegrujeme přes úhly

$$\begin{aligned}
 G_{\vec{k}}(\vec{x}) &= \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\infty \frac{q^2}{k^2 - q^2} dq \int_0^\pi \sin \theta d\theta e^{iqr \cos \theta} = \left\{ \begin{array}{l} \cos \theta = t \\ -\sin \theta d\theta = dt \end{array} \right\} \\
 &= \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\infty \frac{q^2}{k^2 - q^2} dq \int_{-1}^1 e^{iqrt} dt = \frac{1}{4\pi^2 i r} \int_0^\infty \frac{q}{k^2 - q^2} (e^{iqr} - e^{-iqr}) dq \\
 &= -\frac{1}{4\pi^2 i r} \int_{-\infty}^\infty \frac{q e^{iqr}}{q^2 - k^2} dq.
 \end{aligned}$$

Zbývající integrál převedeme do komplexní roviny a spočítáme pomocí reziduové věty. Integrand

$$g(q) = \frac{q e^{iqr}}{q^2 - k^2} = \frac{1}{2} e^{iqr} \left(\frac{1}{q - k} + \frac{1}{q + k} \right),$$

má dva póly v bodech $q = \pm k$. Pro pól v $q = k$ křivku uzavřeme jako na obrázku 19.1 vlevo, poloměr kružnice pošleme limitně do nekonečna (integrál po kružnici v limitě vymizí) a nalezneme

$$\int_{-\infty}^\infty \frac{q e^{iqr}}{q^2 - k^2} dq = \oint_{C_k} \frac{q e^{iqr}}{q^2 - k^2} dq = \pi i e^{ikr}.$$

V tomto případě dostaneme rozbíhavou Greenovu funkci

$$G_{\vec{k}}^+(\vec{x}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r}, \quad (19.5)$$

kteřou lze interpretovat jako amplitudu vlny v bodě \vec{x} vyzážené bodovým zdrojem umístěným v počátku. Pro druhý pól v $q = -k$ postupujeme analogicky (viz. obrázek 19.1

vpravo), integrál je roven

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{qe^{iqr}}{q^2 - k^2} dq = \oint_{C_{-k}} \frac{qe^{iqr}}{q^2 - k^2} dq = \pi i e^{-ikr},$$

takže dostaneme sbíhavou Greenovu funkci

$$G_{\vec{k}}^{-}(\vec{x}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{-ikr}}{r}.$$

Pro stacionární rozptylový stav s asymptotickým chováním (19.2) musíme použít $G_{\vec{k}}^{+}(\vec{x})$. Po dosazení (19.5) do Lippmann-Schwingerovy rovnice (19.3) dostaneme

$$\phi_{\vec{k}}(\vec{x}) = \psi_{\vec{k}}(\vec{x}) - \frac{1}{4\pi} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{e^{ik|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|\vec{x}-\vec{x}'|} U(\vec{x}') \phi_{\vec{k}}(\vec{x}') d^3x'. \quad (19.6)$$

Snadno se ukáže, že Lippmann-Schwingerova rovnice automaticky zaručuje asymptotické chování rozptylového stacionárního stavu (19.2). Pro potenciál předpokládáme, že je zanedbatelný pouze pro $|\vec{x}'| = r' < R$. Pro $|\vec{x}| = r \gg R > r'$ pak můžeme použít odhady

$$\begin{aligned} \frac{1}{|\vec{x}-\vec{x}'|} &\approx \frac{1}{r}, \\ k|\vec{x}-\vec{x}'| &= k\sqrt{r^2 - 2\vec{x}\cdot\vec{x}' + r'^2} \approx kr - k\frac{\vec{x}}{r}\cdot\vec{x}' = kr - \vec{k}'\cdot\vec{x}', \end{aligned}$$

kde jsme označili $\vec{k}' = k\frac{\vec{x}}{r}$. Pro velká r tedy platí

$$G_{\vec{k}}^{+}(\vec{x}-\vec{x}') \approx -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{x}'},$$

a po dosazení do Lippmann-Schwingerovy rovnice (19.6) dostaneme

$$\begin{aligned} \phi_{\vec{k}}(\vec{x}) &= \psi_{\vec{k}}(\vec{x}) + \left(-\frac{1}{4\pi} \int_{\mathbb{R}^3} e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{x}'} U(\vec{x}') \phi_{\vec{k}}(\vec{x}') d^3x' \right) \frac{e^{ikr}}{r} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} e^{ikz} + \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \left(-2\pi^2 \int_{\mathbb{R}^3} \bar{\psi}_{\vec{k}'}(\vec{x}) U(\vec{x}') \phi_{\vec{k}}(\vec{x}') d^3x' \right) \frac{e^{ikr}}{r}. \end{aligned}$$

V asymptotické oblasti má tedy $\phi_{\vec{k}}$ skutečně tvar (19.2), přičemž amplituda rozptylu je rovna

$$f(\vec{k}', \vec{k}) = -2\pi^2 \int_{\mathbb{R}^3} \bar{\psi}_{\vec{k}'}(\vec{x}') U(\vec{x}') \phi_{\vec{k}}(\vec{x}') d^3x' = -\frac{4\pi^2 M}{\hbar^2} \langle \psi_{\vec{k}'} | \hat{V} | \phi_{\vec{k}} \rangle. \quad (19.7)$$

Bornova řada

Lippmann-Schwingerovu rovnici (19.3) můžeme řešit iterativně tak, že za $\phi_{\vec{k}}(\vec{x}')$ v integrálu opakovaně dosadíme pravou stranu, tj.

$$\begin{aligned}\phi_{\vec{k}}(\vec{x}) &= \psi_{\vec{k}}(\vec{x}) + \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' G_{\vec{k}}^+(\vec{x} - \vec{x}') U(\vec{x}') \psi_{\vec{k}}(\vec{x}') + \\ &\quad + \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' \int_{\mathbb{R}^3} d^3x'' G_{\vec{k}}^+(\vec{x} - \vec{x}') U(\vec{x}') G_{\vec{k}}^+(\vec{x}' - \vec{x}'') U(\vec{x}'') \phi_{\vec{k}}(\vec{x}'') \\ &= \dots\end{aligned}$$

Každý další člen rozvoje obsahuje o jedna vyšší mocninu potenciálu. Pokud je tedy interakce slabá, je možné členy od jistého řádu zanedbat a přibližně vyjádřit stacionární rozptylový stav pomocí známých funkcí $\psi_{\vec{k}}$ a $G_{\vec{k}}^+$. Dosazením do (19.7) dostaneme Bornovu řadu pro amplitudu rozptylu

$$f(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{4\pi^2 M}{\hbar^2} \langle \psi_{\vec{k}'} | \hat{V} | \phi_{\vec{k}} \rangle = f^{(1)}(\vec{k}', \vec{k}) + f^{(2)}(\vec{k}', \vec{k}) + \dots, \quad (19.8)$$

kde

$$\begin{aligned}f^{(1)}(\vec{k}', \vec{k}) &= -\frac{4\pi^2 M}{\hbar^2} \langle \psi_{\vec{k}'} | \hat{V} | \psi_{\vec{k}} \rangle = -\frac{M}{2\pi\hbar^2} \int_{\mathbb{R}^3} e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{x}'} V(\vec{x}') d^3x', \quad (19.9) \\ f^{(2)}(\vec{k}', \vec{k}) &= -\frac{4\pi^2 M}{\hbar^2} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' \bar{\psi}_{\vec{k}'}(\vec{x}') V(\vec{x}') \int_{\mathbb{R}^3} d^3x'' G_{\vec{k}}^+(\vec{x}' - \vec{x}'') \frac{2M}{\hbar^2} V(\vec{x}'') \psi_{\vec{k}}(\vec{x}'') \\ &= \frac{M^2}{4\pi^2\hbar^4} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' \int_{\mathbb{R}^3} d^3x'' e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{x}'} V(\vec{x}') \frac{e^{i\vec{k}(\vec{x}'-\vec{x}'')}}{|\vec{x}'-\vec{x}''|} V(\vec{x}'') e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}''}.\end{aligned}$$

Jednotlivé členy Bornovy řady můžeme interpretovat tak, že k rozptylu působením potenciálu dojde bodově jednou, dvakrát, atd. 1. Bornovu aproximaci dostaneme prostě tak, že ve vztahu pro amplitudu rozptylu (19.7) nahradíme stacionární rozptylový stav $\phi_{\vec{k}}$ rovinnou vlnou $\psi_{\vec{k}}$. V tomto přiblížení je amplituda rozptylu až na násobek rovna Fourierově transformaci potenciálu. 1. Bornovu aproximaci lze použít, pokud je interakce slabá a kinetická energie nalétávající částice dostatečně veliká.

1. Bornova aproximace pro sféricky symetrické potenciály

Pro sféricky symetrický potenciál je amplituda rozptylu v 1. Bornově aproximaci rovna

$$f^{(1)}(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{M}{2\pi\hbar^2} \int_{\mathbb{R}^3} e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{x}'} V(|\vec{x}'|) d^3x'.$$

Označíme přenesenou hybnost

$$\hbar\vec{q} = \hbar(\vec{k}' - \vec{k}),$$

velikost q je potom rovna

$$q = |\vec{k}' - \vec{k}| = \sqrt{k'^2 - 2kk' \cos \theta + k^2} = \sqrt{2k^2(1 - \cos \theta)} = 2k \sin \frac{\theta}{2}.$$

Zvolíme si lokální souřadný systém (x', y', z') tak, že osa z' míří ve směru \vec{q} a integrál převedeme do sférických souřadnic (r', θ', φ')

$$f^{(1)}(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{M}{2\pi\hbar^2} \int_0^\infty r'^2 dr' \int_0^\pi \sin \theta' d\theta' \int_0^{2\pi} d\varphi' e^{-iqr' \cos \theta'} V(r').$$

Integrál přes úhly je roven

$$\int_0^\pi \sin \theta' d\theta' \int_0^{2\pi} d\varphi' e^{-iqr' \cos \theta'} = 2\pi \left[\frac{e^{-iqr' \cos \theta'}}{iqr'} \right]_0^\pi = \frac{4\pi}{qr'} \sin(qr').$$

Pro amplitudu rozptylu pak dostaneme

$$f^{(1)}(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{M}{\hbar^2 k \sin \frac{\theta}{2}} \int_0^\infty r' V(r') \sin \left(2kr' \sin \frac{\theta}{2} \right) dr' = f_k^{(1)}(\theta). \quad (19.10)$$

Amplituda tedy závisí pouze na úhlu θ , a ne na φ . Pro sféricky symetrický potenciál to platí pro všechny řády Bornova rozvoje, tj. $f(\vec{k}', \vec{k}) = f_k(\theta)$, jak lze vidět z rotační symetrie úlohy okolo osy odpovídající směru dopadajících částic (osa z).

Metoda parciálních vln

Pro sféricky symetrický potenciál lze nalézt jiný typ rozvoje amplitudy rozptylu, který nezávisí na síle interakce. Můžeme ho využít i v případech, kde poruchový rozvoj není vůbec možný (např. pro rozptyl na tvrdé kouli, kdy je potenciál nekonečný pro $r < R$, viz. cvičení 62) Využijeme toho, že celkový hamiltonián je skalár a má tedy společné vlastní vektory s momentem hybnosti. Stacionární rozptylový stav splňující asymptotické chování

$$\phi_{\vec{k}}(\vec{x}) \approx \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \left(e^{ikz} + f_k(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \right), \quad (19.11)$$

můžeme rozvinout do sférických vln. V rozvoji budou hrát roli pouze stavy s $m = 0$ (pak platí $Y_{l0}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta)$). Moment hybnosti je totiž integrál pohybu, tj. kvantová

čísla l a m se zachovávají, a pro dopadající částici je $m = 0$ (je to rovinná vlna šířící se ve směru osy z). Její rozklad do sférických vln je (viz. (10.14))

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} e^{ikz} = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos\theta),$$

kde j_l jsou sférické Besselovy funkce a P_l jsou Legendreovy polynomy. Použijeme asymptotické chování sférické Besselovy funkce

$$j_l(kr) \sim \frac{\sin\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right)}{kr} = \frac{1}{2ikr} \left(e^{i\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right)} - e^{-i\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right)} \right), \quad (19.12)$$

a vztah $i^l = e^{il\frac{\pi}{2}}$, a nalezneme, že rovinná vlna se pro velká r chová jako

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{x}) \approx \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) \frac{\sin\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right)}{kr} P_l(\cos\theta) \quad (19.13)$$

$$\approx \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{1}{2ik} \left[\frac{e^{ikr}}{r} - e^{il\pi} \frac{e^{-ikr}}{r} \right] P_l(\cos\theta). \quad (19.14)$$

V asymptotické oblasti je tedy rovinná vlna superpozicí rozbíhavé ($\frac{e^{ikr}}{r}$) a sbíhavé ($\frac{e^{-ikr}}{r}$) vlny. Do Legendreových polynomů rozvineme i amplitudu rozptylu (to lze udělat s každou funkcí θ ; dodatečný faktor $2l+1$ zjednoduší následující výpočty)

$$f_k(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) F_l(k) P_l(\cos\theta), \quad (19.15)$$

kde $F_l(k)$ je amplituda rozptylu l -té parciální vlny. Rozvoje (19.15) a (19.14) dosadíme do (19.11) a nalezneme

$$\phi_{\vec{k}}(\vec{x}) \approx \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{1}{2ik} \left[\underbrace{(1 + 2ikF_l(k))}_{S_l(k)} \frac{e^{ikr}}{r} - e^{il\pi} \frac{e^{-ikr}}{r} \right] P_l(\cos\theta). \quad (19.16)$$

Vidíme, že v asymptotické oblasti je stacionární rozptylový stav opět roven superpozici rozbíhavé a sbíhavé vlny. V porovnání s rovinnou vlnou (19.14) je v rozvoji u rozbíhavé vlny navíc faktor $S_l(k) = 1 + 2ikF_l(k)$. Komplexní číslo $S_l(k)$ má velikost rovnou jedné. Pro pružný rozptyl, kdy nedochází k absorpci částic, musí totiž být tok dopadajících částic stejný, jako tok vyletujících částic, tj. koeficienty u sbíhavé a rozbíhavé vlny v (19.16) musí mít stejnou velikost

$$|S_l(k)| = |-e^{il\pi}| = 1.$$

Zavedeme si relativní fázové posunutí l -té parciální vlny $\delta_l(k)$ vztahem

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

Stacionární rozptylový stav (19.16) lze pak vyjádřit ve tvaru

$$\phi_{\vec{k}}(\vec{x}) \approx \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \sum_{l=0}^{\infty} i^l e^{i\delta_l(k)} (2l+1) \frac{\sin(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l(k))}{kr} P_l(\cos\theta).$$

V porovnání s rovinnou vlnou (19.13) vidíme, že se argument sinu l -té parciální vlny posune o $\delta_l(k)$. Fázové posunutí tedy popisuje vliv potenciálu na l -tou parciální vlnu - pro $V = 0$ je $\phi_{\vec{k}} \equiv \psi_{\vec{k}}$, a tedy $S_l(k) = 1$, resp. $\delta_l(k) = 0$. Pomocí fázových posunutí můžeme vyjádřit amplitudu rozptylu l -té parciální vlny

$$F_l(k) = \frac{S_l(k) - 1}{2ik} = e^{i\delta_l(k)} \frac{\sin \delta_l(k)}{k}.$$

Celková amplituda rozptylu (19.15) je pak rovna

$$f_k(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l(k)} \sin \delta_l(k) P_l(\cos\theta). \quad (19.17)$$

Diferenciální účinný průřez

$$\begin{aligned} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_k &= |f_k(\theta)|^2 \\ &= \frac{1}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{l'=0}^{\infty} (2l+1)(2l'+1) e^{i(\delta_l(k) - \delta_{l'}(k))} \sin \delta_l(k) \sin \delta_{l'}(k) P_l(\cos\theta) P_{l'}(\cos\theta), \end{aligned}$$

je ovlivněn interferencí členů s různými hodnotami l . V celkovém účinném průřezu tato interference zmizí kvůli ortogonalitě Legendreových polynomů

$$\int_0^{\pi} P_l(\cos\theta) P_{l'}(\cos\theta) \sin\theta d\theta = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'}. \quad (19.18)$$

Pro celkový účinný průřez pružného rozptylu na sféricky symetrickém potenciálu platí

$$\sigma(k) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_k = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k) = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l(k). \quad (19.19)$$

Lze ho tedy napsat jako součet účinných průřezů pro jednotlivé parciální vlny

$$\sigma_l(k) = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k) = 4\pi(2l+1) |F_l(k)|^2. \quad (19.20)$$

Uvažujme nyní imaginární část amplitudy rozptylu

$$\text{Im} f_k(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k) P_l(\cos\theta).$$

Pro Legendreovy polynomy platí $P_l(1) = 1$, takže pro nulový úhel dostaneme

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

Tento vztah je speciální případ tzv. optického teorému.

Amplituda rozptylu (19.17), resp. celkový účinný průřez (19.19), jsou dány nekonečnou sumou přes parciální vlny s různými hodnotami l . Pro potenciály konečného dosahu R stačí uvažovat pouze konečný počet parciálních vln, přičemž l_{max} lze odhadnout následující úvahou. Na částici s momentem hybnosti l působí ve vzdálenosti R odstředivá bariéra $\sim \frac{\hbar^2 l^2}{2MR^2}$. Pokud je energie částice mnohem menší, bariérou nepronikne a vůbec se nedostane do oblasti nenulového potenciálu. Z podmínky

$$\frac{\hbar^2 l^2}{2MR^2} \gg E = \frac{\hbar^2 k^2}{2M},$$

plyne, že pro $l \gg kR$ jsou fázová posunutí velmi malá. Stačí tedy uvažovat parciální vlny s $l < l_{max} \approx kR$. Pro malé energie dopadajících částic tedy dochází k rozptylu především v s vlně ($l = 0$).

Lze ukázat, že pro přitažlivý potenciál ($V(r) \leq 0$) jsou fázová posunutí kladná. Naopak, pro odpudivý potenciál jsou záporná.

Z ortogonality Legendreových polynomů (19.18) plyne, že amplitudu rozptylu l -té parciální vlny lze vyjádřit z celkové amplitudy vztahem

$$F_l(k) = \frac{1}{2} \int_0^\pi f_k(\theta) P_l(\cos \theta) \sin \theta d\theta \quad (19.21)$$

Pro slabou interakci a velké energie dopadající částice pak můžeme $f_k(\theta)$ nahradit 1. Bornovou aproximací (19.10). Fázová posunutí i amplitudy jsou malé, takže přibližně platí

$$\sin \delta_l(k) \approx \delta_l(k) \approx k F_l(k).$$

Známe-li amplitudu rozptylu v 1. Bornově aproximaci, můžeme z těchto vztahů určit přibližný tvar fázových posunutí.

Přesný tvar fázových posunutí můžeme určit, pokud umíme vyřešit bezčasovou Schrödingerovu rovnici pro daný sféricky symetrický potenciál $V(r)$ konečného dosahu. Stacionární rozptylový stav můžeme zapsat jako superpozici společných vlastních funkcí \hat{H} , \hat{L}^2 a \hat{L}_3 , které můžeme zapsat ve tvaru

$$\phi_{klm}(r, \theta, \varphi) = R_{kl}(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi).$$

V rozvoji budou pouze stavy s $m = 0$, pro porovnání s (19.16) ho zapíšeme ve tvaru

$$\phi_{\vec{k}}(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l R_{kl}(r) P_l(\cos \theta). \quad (19.22)$$

Funkce $R_{kl}(r)$ jsou řešením radiální rovnice s potenciálem $V(r)$

$$\left[\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) - \left(\frac{2M}{\hbar^2} V(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) + k^2 \right] R_{kl}(r) = 0. \quad (19.23)$$

Mimo dosah potenciálu (tj. $r > R$) se tato rovnice zredukuje na radiální rovnici pro volnou částici (viz. kapitola 10)

$$\left[\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 \right] R_{kl}(r) = 0.$$

Jejím řešením je lineární kombinace sférických Besselových a Neumannových funkcí

$$R_{kl}(r) = a_l j_l(kr) + b_l n_l(kr).$$

Koeficienty a_l a b_l určíme tak, abychom dostali správné asymptotické chování stacionárního rozptylového stavu (19.16) pro $r \rightarrow \infty$. Asymptotika Besselovy funkce je ve vztahu (19.12), pro Neumannovu funkci platí

$$n_l(kr) \approx -\frac{1}{kr} \cos\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right) = -\frac{1}{2kr} \left(e^{i(kr - l\frac{\pi}{2})} + e^{-i(kr - l\frac{\pi}{2})} \right).$$

Dosazením do (19.22) po úpravách dostaneme asymptotický tvar

$$\phi_{\vec{k}}(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l \frac{1}{2ik} \left[(a_l - ib_l) \frac{e^{ikr}}{r} - (a_l + ib_l) \frac{e^{-ikr}}{r} \right] P_l(\cos\theta).$$

Porovnáním s (19.16) nalezneme vztahy

$$\begin{aligned} a_l - ib_l &= S_l(k) = e^{2i\delta_l(k)}, \\ a_l + ib_l &= 1. \end{aligned}$$

Jejich řešením je

$$\begin{aligned} a_l &= e^{i\delta_l(k)} \cos \delta_l(k), \\ b_l &= -e^{i\delta_l(k)} \sin \delta_l(k). \end{aligned}$$

Musíme tedy nalézt řešení radiální rovnice (19.23) pro $r < R$ (řešení musí být regulární, tj. konečné v $r = 0$), které navážeme na řešení pro $r > R$ ve tvaru

$$R_{kl}(r) = e^{i\delta_l(k)} (\cos \delta_l(k) j_l(kr) - \sin \delta_l(k) n_l(kr)). \quad (19.24)$$

Fázová posunutí $\delta_l(k)$ pak určíme z navazovacích podmínek v $r = R$.

Příklady

Cvičení 60. Uvažujte rozptyl na Yukawově potenciálu

$$V(r) = K \frac{e^{-\alpha r}}{r}, \quad \alpha > 0.$$

Určete diferenciální účinný průřez v 1. Bornově aproximaci.

Návod: Amplituda rozptylu v 1. Bornově aproximaci (19.10) je pro Yukawův potenciál rovna

$$\begin{aligned} f_k^{(1)}(\theta) &= -\frac{KM}{\hbar^2 k \sin \frac{\theta}{2}} \int_0^\infty e^{-\alpha r'} \sin\left(2kr' \sin \frac{\theta}{2}\right) dr' = -\frac{2KM}{\hbar^2 q} \int_0^\infty e^{-\alpha r'} \frac{1}{2i} \left(e^{iqr'} - e^{-iqr'}\right) dr' \\ &= -\frac{KM}{i\hbar^2 q} \int_0^\infty \left(e^{-(\alpha-iq)r'} + e^{-(\alpha+iq)r'}\right) dr' = -\frac{KM}{i\hbar^2 q} \underbrace{\left(\frac{1}{\alpha-iq} - \frac{1}{\alpha+iq}\right)}_{\frac{2iq}{\alpha^2+q^2}} \\ &= -\frac{2KM}{\hbar^2} \frac{1}{\alpha^2 + 4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}}. \end{aligned}$$

Diferenciální účinný průřez je potom

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_k(\theta) = |f_k^{(1)}(\theta)|^2 = \left(\frac{2KM}{\hbar^2}\right)^2 \frac{1}{(\alpha^2 + 4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2})^2}.$$

V limitě $\alpha \rightarrow 0$ Yukawův potenciál přechází v Coulombický. Diferenciální účinný průřez odpovídá klasické Rutherfordově formuli

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_k(\theta) = \left(\frac{2KM}{\hbar^2}\right)^2 \frac{1}{16k^4 \sin^4 \frac{\theta}{2}} = \left(\frac{MK}{2}\right)^2 \frac{1}{p^4 \sin^4 \frac{\theta}{2}}.$$

Dostaneme správný výsledek, byť postup výpočtu pro Coulombický potenciál není korektní - klesá v nekonečnu příliš pomalu, takže rozptylové stavy nemají požadovanou asymptotiku.

Cvičení 61. Uvažujte rozptyl částic na Gaussovském potenciálu

$$V(r) = V_0 e^{-\lambda r^2}, \quad V_0, \lambda > 0.$$

Určete amplitudu rozptylu a diferenciální účinný průřez v 1. Bornově aproximaci. Najděte fázová posunutí pro s a p vlnu v této aproximaci.

Návod: Pro Gaussovský ponteciál je amplituda rozptylu v 1. Bornově aproximaci (19.10) daná integrálem ($q = 2k \sin \frac{\theta}{2}$)

$$\begin{aligned}
f_k^{(1)}(\theta) &= -\frac{2MV_0}{\hbar^2 q} \int_0^\infty r e^{-\lambda r^2} \sin(qr) dr = -\frac{MV_0}{i\hbar^2 q} \left(\int_0^\infty r e^{-\lambda r^2 + iqr} dr - \int_0^\infty r e^{-\lambda r^2 - iqr} dr \right) \\
&= -\frac{MV_0}{i\hbar^2 q} e^{-\frac{q^2}{4\lambda}} \left(\int_0^\infty r e^{-\lambda(r - \frac{iq}{2\lambda})^2} dr - \int_0^\infty r e^{-\lambda(r + \frac{iq}{2\lambda})^2} dr \right) = \left\{ \begin{array}{l} x = r \mp \frac{iq}{2\lambda} \\ dx = dr \\ y = \frac{iq}{2\lambda} \end{array} \right\} \\
&= -\frac{MV_0}{i\hbar^2 q} e^{-\frac{q^2}{4\lambda}} \left(\int_{-y}^\infty (x+y) e^{-\lambda x^2} dx - \int_y^\infty (x-y) e^{-\lambda x^2} dx \right) \\
&= -\frac{MV_0}{i\hbar^2 q} e^{-\frac{q^2}{4\lambda}} \left(\underbrace{\int_{-y}^y x e^{-\lambda x^2} dx}_{=0} + y \left(\underbrace{\int_{-y}^0 e^{-\lambda x^2} dx}_{=0} - \underbrace{\int_0^y e^{-\lambda x^2} dx}_{=0} + 2 \int_0^\infty e^{-\lambda x^2} dx \right) \right) \\
&= -\frac{KMV_0}{i\hbar^2 q} e^{-\frac{q^2}{4\lambda}} y \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} = -\frac{MV_0}{2\hbar^2} \sqrt{\frac{\pi}{\lambda^3}} e^{-\frac{q^2}{4\lambda}} = -\frac{KMV_0}{2\hbar^2} \sqrt{\frac{\pi}{\lambda^3}} e^{-\frac{k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}}{\lambda}} \\
&= -\frac{MV_0}{2\hbar^2} \sqrt{\frac{\pi}{\lambda^3}} e^{-\frac{k^2(1-\cos \theta)}{2\lambda}} \tag{19.25}
\end{aligned}$$

Diferenciální účinný průřez je pak roven

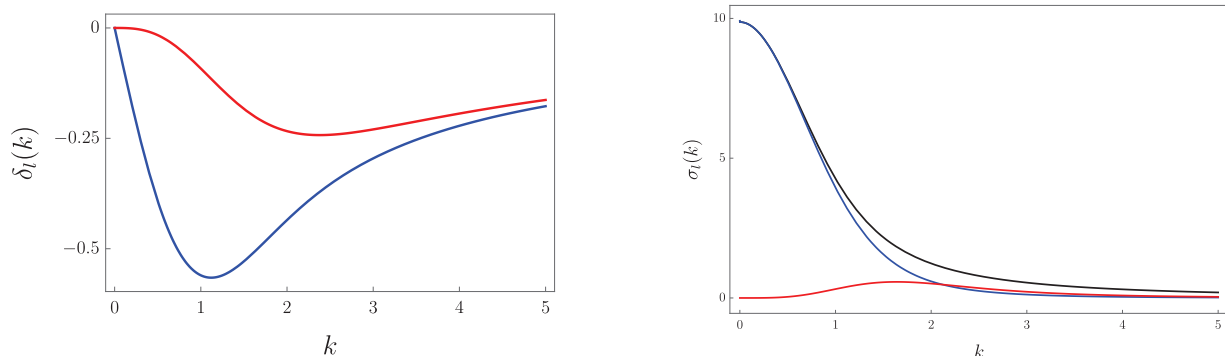
$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_k(\theta) = |f_k^{(1)}(\theta)|^2 = \left(\frac{MV_0}{2\hbar^2} \right)^2 \frac{\pi}{\lambda^3} e^{-\frac{k^2(1-\cos \theta)}{\lambda}}.$$

Celkový účinný průřez je

$$\begin{aligned}
\sigma(k) &= \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_k(\theta) = \left(\frac{MV_0}{2\hbar^2} \right)^2 \frac{\pi}{\lambda^3} 2\pi \int_0^\pi e^{-\frac{k^2(1-\cos \theta)}{\lambda}} \sin \theta d\theta \\
&= \left\{ \begin{array}{l} 1 - \cos \theta = x \\ \sin \theta d\theta = dx \end{array} \right\} = \left(\frac{MV_0}{2\hbar^2} \right)^2 \frac{2\pi^2}{\lambda^3} \int_0^2 e^{-\frac{k^2}{\lambda} x} dx = \left(\frac{MV_0}{2\hbar^2} \right)^2 \frac{2\pi^2}{\lambda^3} \frac{\lambda}{k^2} \left(1 - e^{-\frac{2k^2}{\lambda}} \right) \\
&= \left(\frac{MV_0}{2\hbar^2} \right)^2 \frac{2\pi^2}{\lambda^2 k^2} \left(1 - e^{-\frac{2k^2}{\lambda}} \right). \tag{19.26}
\end{aligned}$$

Amplitudy parciálních vln v 1. Bornově přiblížení určíme ze vztahu (19.21). Pro $l = 0$ je $P_0(t) = 1$, takže platí

$$F_0(k) = -\frac{MV_0}{4\hbar^2} \sqrt{\frac{\pi}{\lambda^3}} \int_0^\pi e^{-\frac{k^2(1-\cos \theta)}{2\lambda}} \sin \theta d\theta = -\frac{MV_0}{2\hbar^2} \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} \frac{1}{k^2} \left(1 - e^{-\frac{k^2}{\lambda}} \right).$$



Obrázek 19.2: Vlevo jsou fázová posunutí pro s (modře) a p (červeně) vlnu. Vpravo jsou parciální účinné průřezy pro s a p vlny a celkový účinný průřez (černě). Všechny parametry jsou rovny jedné, tj. $M = \hbar = V_0 = \lambda = 1$.

Fázové posunutí a parciální účinný průřez s -vlny jsou rovny

$$\delta_0(k) = kF_0(k) = -\frac{MV_0}{2\hbar^2} \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} \frac{1}{k} \left(1 - e^{-\frac{k^2}{\lambda}}\right), \quad (19.27)$$

$$\sigma_0(k) = 4\pi|F_0(k)|^2 = \left(\frac{MV_0}{2\hbar^2}\right)^2 \frac{4\pi^2}{\lambda k^4} \left(1 - e^{-\frac{k^2}{\lambda}}\right)^2. \quad (19.28)$$

Podobně pro p -vlnu dostaneme parciální amplitudu ($P_1(t) = t$)

$$\begin{aligned} F_1(k) &= -\frac{MV_0}{4\hbar^2} \sqrt{\frac{\pi}{\lambda^3}} \int_0^\pi e^{-\frac{k^2(1-\cos\theta)}{2\lambda}} \cos\theta \sin\theta d\theta = -\frac{MV_0}{4\hbar^2} \sqrt{\frac{\pi}{\lambda^3}} \int_0^2 e^{-\frac{k^2 x}{2\lambda}} (1-x) dx \\ &= -\frac{MV_0}{2\hbar^2} \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} \frac{1}{k^2} \left(1 - \frac{2\lambda}{k^2} + e^{-\frac{k^2}{\lambda}} \left(1 + \frac{2\lambda}{k^2}\right)\right). \end{aligned}$$

Fázové posunutí a parciální účinný průřez tedy jsou

$$\delta_1(k) = kF_1(k) = -\frac{MV_0}{2\hbar^2} \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} \frac{1}{k} \left(1 - \frac{2\lambda}{k^2} + e^{-\frac{k^2}{\lambda}} \left(1 + \frac{2\lambda}{k^2}\right)\right), \quad (19.29)$$

$$\sigma_1(k) = 12\pi|F_1(k)|^2 = \left(\frac{MV_0}{2\hbar^2}\right)^2 \frac{12\pi^2}{\lambda k^4} \left(1 - \frac{2\lambda}{k^2} + e^{-\frac{k^2}{\lambda}} \left(1 + \frac{2\lambda}{k^2}\right)\right)^2. \quad (19.30)$$

Pro ilustraci jsou na obrázku 19.2 zobrazeny fázová posunutí (19.27), (19.29), parciální účinné průřezy (19.28), (19.30) a celkový účinný průřez v 1. Bornově aproximaci (19.26). Vidíme, že pro malé energie výrazně dominuje rozptyl v s -vlně.

Cvičení 62. Uvažujte rozptyl na tvrdé kouli, tj. potenciálu

$$V(r) = \begin{cases} \infty & r < R \\ 0 & r > R \end{cases}$$

Nalezněte fázová posunutí a účinný průřez pro l -tou parciální vlnu. Určete jejich explicitní tvar pro s -vlnu. Odhadněte celkový účinný průřez v limitě pro malé, resp. velké energie.

Návod:

Radiální funkce $R_{kl}(r)$ je identicky rovna nule pro $r < R$, pro $r > R$ platí (19.24). Řešení spojitě navážeme v $r = R$, tj.

$$e^{i\delta_l(k)} (\cos \delta_l(k) j_l(kR) - \sin \delta_l(k) n_l(kR)) = 0.$$

Touto podmínkou jsou určena fázová posunutí

$$\tan \delta_l(k) = \frac{j_l(kR)}{n_l(kR)}. \quad (19.31)$$

Pro celkový účinný průřez l -té parciální vlny pak platí

$$\sigma_l(k) = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k) = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \frac{\tan^2 \delta_l(k)}{1 + \tan^2 \delta_l(k)} = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \frac{j_l^2(kR)}{j_l^2(kR) + n_l^2(kR)}. \quad (19.32)$$

Sférické funkce pro $l = 0$ mají tvar

$$j_0(z) = \frac{\sin z}{z}, \quad n_0(z) = -\frac{\cos z}{z},$$

takže pro s -vlnu platí

$$\delta_0(k) = -kR, \quad \sigma_0(k) = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2(kR).$$

Pro malé energie ($kR \ll 1$), kdy v rozptylu dominuje s -vlna, je celkový účinný průřez roven

$$\sigma \approx \sigma_0 \approx \frac{4\pi}{k^2} k^2 R^2 = 4\pi R^2.$$

Pro velké energie ($kR \gg 1$) lze ukázat, že platí

$$\sigma(k) \approx 2\pi R^2.$$

Sumu (19.19) rozdělíme na dvě části

$$\sigma(k) = \sum_{l=0}^{l_{max}} \sigma_l(k) + \sum_{l=l_{max}+}^{\infty} \sigma_l(k),$$

kde $l_{max} \approx kR$. Pro $l > l_{max}$ aproximujeme sférické funkce pomocí jejich chování blízko nuly

$$j_l(z) \approx \frac{z^l}{(2l+1)!!}, \quad n_l(z) \approx -\frac{(2l-1)!!}{z^{l+1}}. \quad (19.33)$$

Pro tangens fázového posunutí pak přibližně platí

$$\tan \delta_l(k) \approx -\frac{(kR)^{2l+1}}{(2l+1)!!(2l-1)!!} \approx \underbrace{\left(\frac{kR}{2l}\right)^2}_{\ll 1} \tan \delta_{l-1}(k).$$

Příspěvek členů s $l > l_{max}$ tedy klesá rychle k nule a můžeme ho zanedbat. Pro $l < l_{max}$ naopak použijeme asymptotické chování sférických funkcí

$$j_l(kR) \approx \frac{\sin(kR - l\frac{\pi}{2})}{kR}, \quad n_j l(kR) \approx -\frac{\cos(kR - l\frac{\pi}{2})}{kR}.$$

Tangens fázového posunutí je pak přibližně roven

$$\tan \delta_l(k) \approx -\tan(kR - l\frac{\pi}{2}).$$

Fázová posunutí $\delta_l(k)$ a $\delta_{l+1}(k)$ se tedy liší o $\frac{\pi}{2}$. Součet totálních účinných průřezů pro l -tou a $l+1$ -ní parciální vlnu lze nahradit

$$\sigma_l(k) + \sigma_{l+1}(k) \approx \frac{4\pi}{k^2} [(2l+1) \sin^2 \delta_l(k) + (2l+3) \cos^2 \delta_l(k)] \approx \frac{4\pi}{k^2} (2l+2).$$

Pro $l < l_{max}$ tedy bude přibližně platit

$$\sigma_l(k) \approx \frac{\sigma_l(k) + \sigma_{l+1}(k)}{2} \approx \frac{4\pi}{k^2} (l+1).$$

Pro celkový účinný průřez pak nalezneme odhad

$$\sigma(k) \approx \sum_{l=0}^{l_{max}} \sigma_l(k) \approx \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{kR} (l+1) \approx \frac{4\pi}{k^2} \frac{(kR)^2}{2} = 2\pi R^2.$$

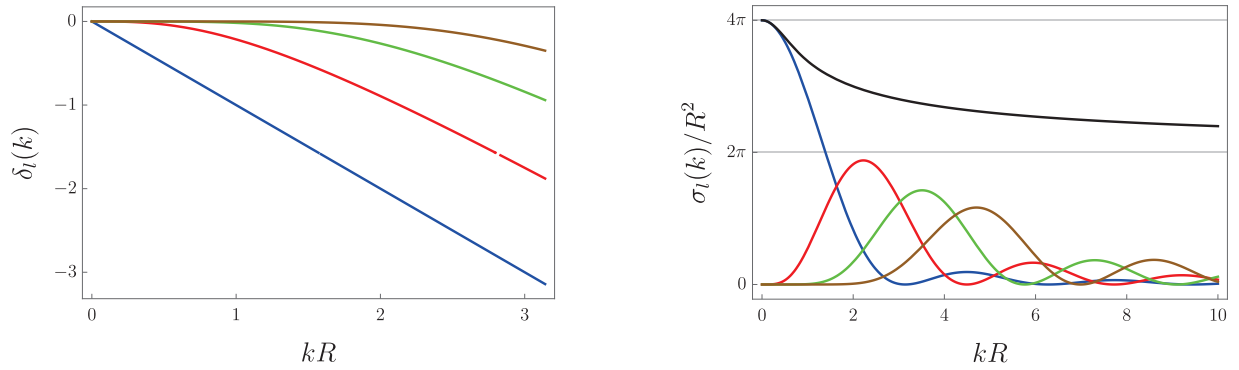
Pro ilustraci jsou na obrázku 19.3 znázorněna fázová posunutí a účinné průřezy pro parciální vlny s $l = 0, 1, 2, 3$. Vpravo je černou čarou vykreslen totální účinný průřez. Z grafu je vidět, že pro malé energie v rozptylu dominuje s -vlna, a pro $k \rightarrow 0$ platí $\sigma \rightarrow 4\pi R^2$. Pro velké energie se totální účinný průřez blíží hodnotě $2\pi R^2$.

Cvičení 63. Uvažujte rozptyl částice na sférické dutině obalené δ -funkcí, tj. potenciálu

$$V(r) = \frac{\alpha}{R} \delta(r - R).$$

Určete fázová posunutí a účinný průřez pro l -tou parciální vlnu.

Návod: Nejprve musíme nalézt radiální vlnovou funkci $R_{kl}(r)$. Mimo bod $r = R$ je potenciál nulový, takže se jedná o volnou částici. Pro $r > R$ má tedy řešení tvar (19.24). Uvnitř



Obrázek 19.3: Fázová posunutí $\delta_l(k)$ (vlevo) a účinný průřez $\sigma_l(k)$ (vpravo) pro l -tou parciální vlnu jako funkce kR . Modře je s -vlna ($l = 0$), červeně p -vlna ($l = 1$), zeleně d -vlna ($l = 2$) a hnědě f -vlna ($l = 3$). Vpravo je černě vykreslen celkový účinný průřez $\sigma(k)$.

slupky je řešením pouze násobek sférické Besselovy funkce (musí být v nule konečné, a sférické Neumannovy funkce divergují v nule), tj.

$$R_{kl}(r) = A_l(k)j_l(kr), \quad r < R.$$

Řešení spojitě navážeme v $r = R$, tj. platí

$$A_l(k)j_l(kR) = e^{i\delta_l(k)} [\cos \delta_l(k)j_l(kR) - \sin \delta_l(k)n_l(kR)]. \quad (19.34)$$

Druhou navazovací podmínku dostaneme z první derivace. Ta není v $r = R$ spojitá, ale má skok daný silou δ -funkce (viz. kapitola 2)

$$R'_{kl}(R^+) - R_{kl}(R^-) = \frac{2M\alpha}{\hbar^2 R} R_{kl}(R).$$

V našem případě dostaneme (označili jsme $q = \frac{2M\alpha}{\hbar^2}$)

$$k e^{i\delta_l(k)} [\cos \delta_l(k)j'_l(kR) - \sin \delta_l(k)n'_l(kR)] - k A_l(k)j'_l(kR) = \frac{q}{R} A_l(k)j_l(kR).$$

Za pravou stranu dosadíme z (19.34), vynásobíme $j_l(kR)$ a opět dosadíme za $A_l(k)j_l(kR)$ na levé straně z (19.34), po algebraických úpravách nalezneme

$$-\sin \delta_l(k) \underbrace{[j_l(kR)n'_l(kR) - j'_l(kR)n_l(kR)]}_{W_l(kR)} = \frac{q}{kR} j_l(kR) [\cos \delta_l(k)j_l(kR) - \sin \delta_l(k)n_l(kR)]. \quad (19.35)$$

Na levé straně je tzv. Wronskián

$$W_l(z) = \det \begin{pmatrix} j_l(z) & n_l(z) \\ j'_l(z) & n'_l(z) \end{pmatrix} = j_l(z)n'_l(z) - j'_l(z)n_l(z).$$

Ukážeme, že $W_l(z) = \frac{1}{z^2}$. Funkce j_l a n_l splňují sférickou Besselovu rovnici (10.10)

$$\begin{aligned} j_l'' + \frac{2}{z}j_l' + \left(1 - \frac{l(l+1)}{z^2}\right)j_l &= 0, \\ n_l'' + \frac{2}{z}n_l' + \left(1 - \frac{l(l+1)}{z^2}\right)n_l &= 0. \end{aligned}$$

První rovnici vynásobíme n_l , druhou j_l a odečteme je od sebe - tím dostaneme diferenciální rovnici pro Wronskián

$$\underbrace{j_l''n_l - j_l'n_l''}_{W_l'} + \frac{2}{z}\underbrace{(j_l'n_l - j_l'n_l')}_{-W_l} = 0 \implies W_l' - \frac{2}{z}W_l = 0.$$

Řešením je $W_l(z) = \frac{c}{z^2}$. Zbývá určit konstantu c . Tu můžeme nalézt např. z chování funkcí $j_l(z)$ a $n_l(z)$ pro malé z (19.33). Pro $l \neq 0$ dostaneme

$$\begin{aligned} W_l(z) &= \frac{z^l}{(2l+1)!!} \frac{d}{dz} \left(-\frac{(2l-1)!!}{z^{l+1}} \right) - \left(-\frac{(2l-1)!!}{z^{l+1}} \right) \frac{d}{dz} \frac{z^l}{(2l+1)!!} \\ &= \frac{l+1}{2l+1} \frac{1}{z^2} + \frac{l}{2l+1} \frac{1}{z^2} = \frac{1}{z^2}. \end{aligned}$$

Pro $l = 0$ platí

$$W_0(z) = 1 \frac{d}{dz} \left(-\frac{1}{z} \right) - \left(-\frac{1}{z} \right) \frac{d}{dz} 1 = \frac{1}{z^2}.$$

V obou případech je tedy $c = 1$. Po dosazení za Wronskián má rovnice (19.35) tvar

$$-\frac{1}{(kR)^2} \sin \delta_l(k) = \frac{q}{kR} j_l^2(kR) \cos \delta_l(k) - \frac{q}{kR} j_l(kR) n_l(kR) \sin \delta_l(k),$$

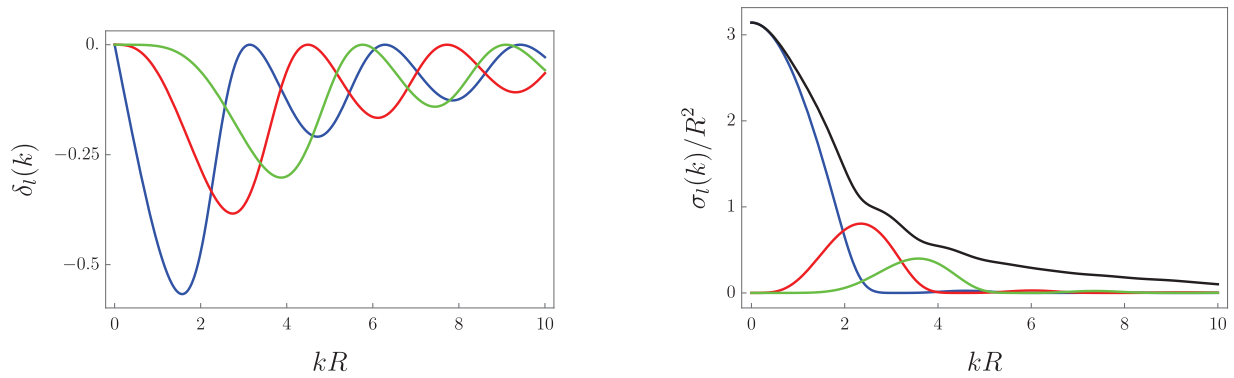
ze kterého vyjádříme tangens fázového posunutí

$$\tan \delta_l(k) = \frac{q j_l^2(kR)}{q j_l(kR) n_l(kR) - \frac{1}{kR}}. \quad (19.36)$$

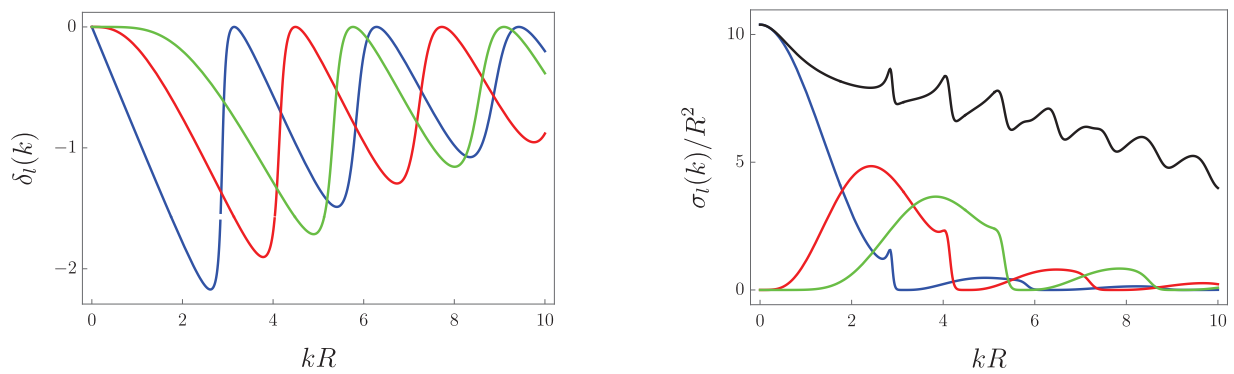
Pro účinný průřez l -té parciální vlny pak platí

$$\begin{aligned} \sigma_l(k) &= \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k) = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \frac{\tan^2 \delta_l(k)}{1 + \tan^2 \delta_l(k)} \\ &= \frac{q^2 j_l^4(kR)}{q^2 j_l^4(kR) + \left(q j_l(kR) n_l(kR) - \frac{1}{kR} \right)^2}. \end{aligned} \quad (19.37)$$

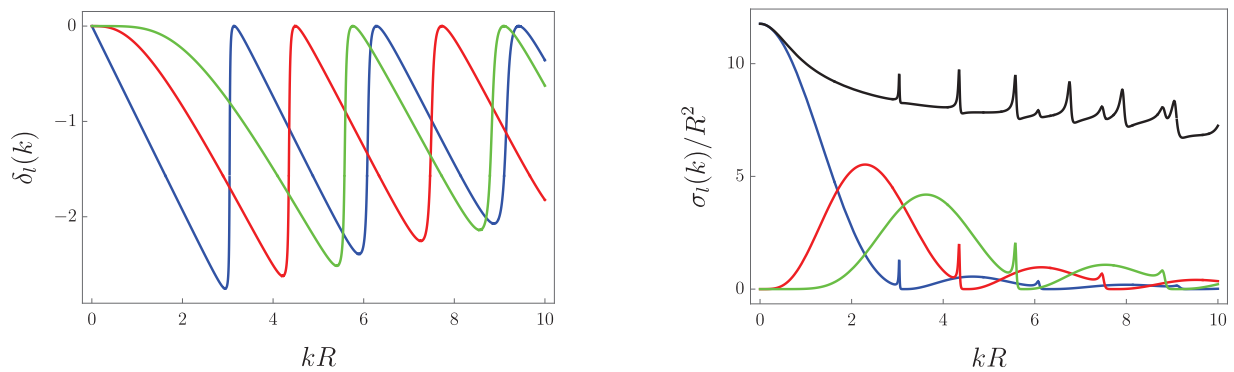
Na obrázcích 19.4, 19.5 a 19.6 jsou fázová posunutí a účinné průřezy pro různé parciální vlny jako funkce kR pro různou sílu interakce ($q = 1, 10, 30$). Modrá čára odpovídá s -vlně ($l = 0$), červená p -vlně ($l = 1$) a zelená d -vlně ($l = 2$). Vpravo je černou čarou vyznačen celkový účinný průřez.



Obrázek 19.4: Fázová posunutí a účinné průřezy pro $q = 1$.



Obrázek 19.5: Fázová posunutí a účinné průřezy pro $q = 10$.



Obrázek 19.6: Fázová posunutí a účinné průřezy pro $q = 30$.

S rostoucím q jsou na parciálních účinných průřezích i celkovém patrné ostré píky. Ty odpovídají rezonancím, tj. kvazivázaným stavům. V limitě pro $q \rightarrow \infty$ (resp. $\alpha \rightarrow \infty$) vede

Hladina	1s	1p	1d	2s	1f	2p	1g
Hodnota $k_{nl}R$	π	4.49	5.76	2π	6.98	7.73	8.18

Tabulka 19.1: Numerické hodnoty kořenů sférických Besselových funkcí pro $k_{nl}R < 9$. Je použito spektroskopické značení hladin nl , tj. $s \leftrightarrow l = 0$, $p \leftrightarrow l = 1$, $d \leftrightarrow l = 2$, $f \leftrightarrow l = 3$, $g \leftrightarrow l = 4$.

sférická slupka s δ -funkcí na neprostupnou kouli, tj. k potenciálu

$$V_{\alpha \rightarrow \infty}(R) = \begin{cases} 0 & r < R \\ \infty & r > R \end{cases}$$

Hamiltonián má pak diskrétní spektrum. Radiální rovnice (19.23) je pro tento potenciál

$$\left[\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} + k_{nl}^2 \right] R_{nl}(r) = 0, \quad k_{nl}^2 = \frac{2M}{\hbar^2} E_{nl}$$

s okrajovou podmínkou

$$R_{nl}(R) = 0. \quad (19.38)$$

Regulární řešení je

$$R_{nl}(r) = j_l(k_{nl}r).$$

Energie vázaných stavů částice v neprostupné kouli jsou určeny okrajovou podmínkou (19.38), tj.

$$j_l(k_{nl}R) = 0.$$

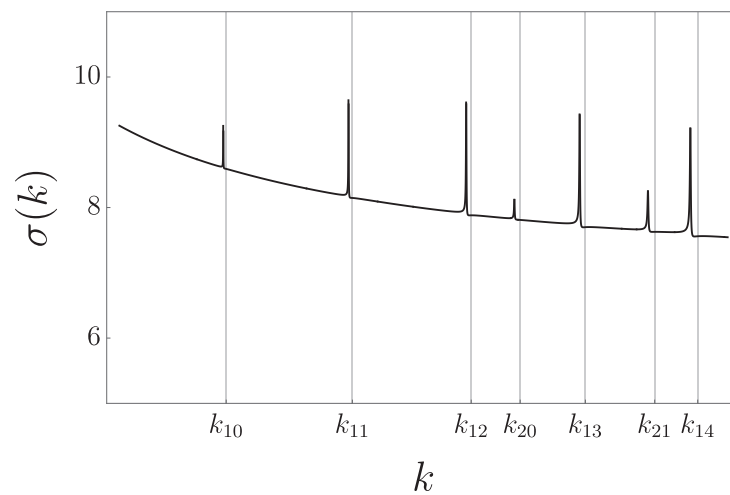
Pro s -stavy ($l = 0$) je $j_0(z) = \frac{\sin z}{z}$, takže musí platit

$$k_{n0}R = n\pi.$$

Z této podmínky dostaneme

$$E_{n0} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2MR^2}$$

To souhlasí s energií částice v nekonečně jámě šířky R . Energie stavů s $l \neq 0$ (resp. k_{nl}) se musí určit numerickým nalezením kořenů sférických Besselových funkcí. Hodnoty kořenů pro $k_{nl}R < 9$ jsou uvedeny v tabulce 19.1. Pro ilustraci je na obrázku 19.7 celkový účinný průřez pro $q = 100$ a $R = 1$. Píky jsou velmi blízko hodnotám k_{nl} odpovídající rezonancím uvedeným v tabulce 19.1.



Obrázek 19.7: Celkový účinný průřez pro $q = 100$ a $R = 1$. Píky odpovídají rezonancím, tj. kvazivázaným stavům částice uvnitř dutiny. Energie jsou blízké hodnotám pro vázané stavy částice v neprostupné kouli uvedené v tabulce 19.1