Andrzej Raczyński
Mechanika kwantowa cz. 6

1 Zderzenia

1.1 Funkcje zmiennej zespolonej

Funkcje zmiennej zespolonej $u = f(z)$ określone są na zbiorze liczb zespolonych i przyjmują wartości zespolone. Algebra funkcji zespolonych, pojęcie granicy, ciągłości, definicja pochodnej, reguły różniczkowania, rozwinięcie w szereg Taylora, całka nieoznaczona są analogiczne, jak dla funkcji rzeczywistych. Dodatkową funkcją jest sprzężenie zespolone, które jest operacją nieciągłą.

Specjalną klasą funkcji zmiennej zespolonej stanowią funkcje analityczne. Funkcja $f(z)$ jest analityczna w punkcie z_0, gdy można ją rozwinąć w szereg Taylora, zbieżny w otoczeniu tego punktu.

Przykładem funkcji nieanalitycznej w z_0 jest $f(z) = \frac{g(z)}{(z-z_0)^n}$, gdzie $g(z)$ jest funkcją analityczną; z_0 jest wtedy biegunem n-krotnym.

Inny przkład funkcji nieanalitycznych w pewnym obszarze to funkcje wieloznaczne. Jeśli argument zapiszemy zapiszemy postaci $z = r\exp(i\phi)$, oczywiście zachodzi $r\exp[i(\phi + 2\pi)] = r\exp(i\phi)$,ale może się zdarzyć, że $f(r\exp[i(\phi + 2\pi)]) \neq f(r\exp(i\phi))$. Tak jest w przypadku funkcji $\sqrt{z}$ lub ogólniej $z^{\frac{1}{n}}$. Funkcja ta jest n-znaczna: po n- krotnym dodaniu 2π do argumentu wartość funkcji wraca do wartości wyjściowej. Dla pierwiastka stopnia n zachodzi

$$z^{\frac{1}{n}} = [r\exp(i\phi)]^{\frac{1}{n}} = r^{\frac{1}{n}}\exp[i\frac{\phi + 2k\pi}{n}],\ k = 0, 1, ..., n-1$$

Innym przykładem jest logarytm naturalny $\log z$ - krotność jest tu nieskończona.

Definiuje się całkę krzywoliniową. Krzywa C jest zadana najczęściej przez parametr rzeczywisty t: $x = x(t)$, $y = y(t)$, gdzie $z = x + iy$. Całka jest określona jako

$$\int_C f(z)dz = \int_{t_1}^{t_2} f(x(t) + iy(t))(x'(t) + iy'(t))dt. \tag{1}$$

Obowiązuje podstawowe twierdzenie rachunku całkowego

$$\int_{z_1}^{z_2} f(z)dz = F(z_2) - F(z_1), \tag{2}$$

gdzie F jest funkcją pierwotną dla f, tzn. $\frac{d}{dz}F(z) = f(z)$. W szczególności

$$\int_{z_1}^{z_2} z^n dz = \frac{z_2^{n+1}}{n+1} - \frac{z_1^{n+1}}{n+1} \tag{3}$$

dla $n > 0$. Całka po krzywej zamkniętej z funkcji analiycznej (jako suma całek z funkcji potęgowych) jest równa zero, co widać z powyższych wzorów dla $z_2 = z_1$. Oznacza to, że krzywą całkowania można deformować dowolnie pod warunkiem, że pozostaje się w obszarze analityczności funkcji.

Inaczej wygląda sprawa funkcji $\frac{1}{z}$.

$$\int_{z_1}^{z_2} \frac{1}{z} dz = \log z_2 - \log z_1, \tag{4}$$

Dla krzywej w postaci okręgu o promieniu r i środku z $z = 0$ $z = r\exp(i\phi)$ $dz = ir\exp(i\phi)$

$$\oint_c \frac{1}{z} dz = \int_0^{2\pi} \frac{1}{r\exp(i\phi)} ir\exp(i\phi)d\phi = 2\pi i. \tag{5}$$

W obszarze, w którym $z \neq 0$ funkcja $\frac{1}{z}$ jest analityczna, a więc całka z funkcji $\frac{1}{z}$ po dowolnej krzywej otaczającej punkt $z = 0$ jest równa $2\pi i$, a jeśli $z = 0$ nie leży wewnątrz obszaru zamkniętego krzywą - całka jest równa zero. Jeśli rozważyć $\oint_C f(z)dz$ z funkcji, która ma w obszarze zamkniętym krzywą biegun jednokrotny w punkcie z_0, to można napisać

$$\oint_C f(z)dz = \oint_C \frac{f(z)(z - z_0)}{z - z_0} dz. \tag{6}$$

Funkcja w liczniku jest analityczna. Krzywą całkowania można ściągnąć do okręgu o środku z_0 i dowolnie małym promieniu. Wtedy liczbę $lim_{z \to z_0} f(z)(z-$

$z_0) \equiv res_f(z_0)$, nazywaną residuum funkcji f w biegunie z_0 można wyjąć spod całki, a wynik całkowania jest $2\pi i$. Ostatecznie

$$\oint_C f(z)dz = 2\pi i\, res_{z=z_0} f(z_0) \tag{7}$$

Jeśli orientacja krzywej jest ujemna, tzn. obchodząc obszar mamy go po prawej stronie, należy dodatkowo zmienı'c znak.

Jeśli w obszarze zamkniętym krzywą znajduje się wiele biegunów, wartość całki to suma residuów po wszystkich biegunach (mnożona przez $\pm 2\pi i$). To twierdzenie, zwane twiedzeniem Cauchy'ego ma uogólnieenie dla biegunów wielokrotnnych.

Jako przykład obliczmy całkę

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin x}{x} dx.$$

Funkcja podcałkowa nie jest osobliwa w $x = 0$. Jej granica w tym punkcie wynosi 1. Dodajmy do mianownika liczbę urojoną $-i\eta$, gdzie η jest dowolnie małą liczbą dodatnią. Zmienną x potraktujmy jako zespoloną z. Całka ma postać

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin z}{z - i\eta} dz = \frac{1}{2i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(iz)}{z - i\eta} dz - \frac{1}{2i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(-iz)}{z - i\eta} dz.$$

Istotą metody obliczenia jest zamknięcie konturu całkowania, tak aby nie zmienić wartości całki, ale móc zastosować twierdzenie Cauchyego. Dodajmy do pierwszej całki kontur w postaci półokręgu o promieniu zmierzającym do nieskończoności, położonego w górnej półpłaszczyźnie. Tam $\exp(iz) \equiv \exp[i(z' + iz'')]$ zmierza do zera bo $z'' > 0$ i wkład do całki od półokręgu zmierza do zera. Wtedy

$$\frac{1}{2i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(iz)}{z - i\eta} dz = \frac{1}{2i} \oint_{C_1} \frac{\exp(iz)}{z - i\eta} dz,$$

gdzie C_1 jest zamkniętym konturem obejmującym oś rzeczywistą i wspomniany półokrąg. Funkcja podcałkowa posiada biegun w $z = i\eta$ w górnej półpłaszczyźnie. Zastosowanie twierdzenia Cauchy'ego prowadzi do

$$\frac{1}{2i} \oint_{C_1} \frac{\exp(iz)}{z - i\eta} dz = \frac{1}{2i} 2\pi i\, res_{z=i\eta} \frac{\exp(iz)}{z - i\eta} = \pi lim_{z \to i\eta} \frac{\exp(iz)}{z - i\eta} (z - i\eta) = \pi,$$

gdzie na końcu wykonano przejście do granicy $\eta \to 0$.

Druga z całek

$$-\frac{1}{2i}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\exp(-iz)}{z-i\eta}dz$$

może być obliczona podobnie. Kontur całkowania należy zamknąć w dolnej półpłaszczyźnie, bo $\exp(-iz) = \exp[-i(z' + iz'')]$, bo tam $z'' < 0$ i wkład do całki od półokręgu o promieniu zmierzającym do nieskończoności jest zerowy. Wtedy

$$\frac{1}{2i}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\exp-(iz)}{z-i\eta}dz = \frac{1}{2i}\int_{C_2}\frac{\exp(-iz)}{z-i\eta}dz,$$

gdzie C_2 jest zamkniętym konturem obejmującym oś rzeczywistą i i półokrąg w dolnej półpłaszczyźnie. Zastosowanie twierdzenia Cauchy'ego w tym przypadku staje się trywialne, bo jedyny biegun leży na zewnątrz obszaru zamknięgo krzywą C_2. Stąd ostatnia całka się zeruje. Ostatecznie

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\sin x}{x}dx = \pi.$$

1.2 Zderzenia potencjalne. Amplituda rozpraszania i przekrój czynny

Zderzenie można opisywać na dwa sposoby. W wersji zależnej od czasu pakiet falowy leci w kierunku centrum rozpraszającego i w wyniku oddziaływania dzieli się na fragmenty o różnej wielkości, lecące w różnych kierunkach. Celem jest określenie, z jakim prawdopodobieństwem cząstka poleci w daną stronę, a narzędziem jest równanie Schrödingera zależne od czasu. Zaletą formalną jest użycie normowalnych funkcji falowych. W wersji niezależnej od czasu centrum jest ostrzeliwane stacjonarnym strumieniem cząstek padających, celem jest obliczenie strumienia cząstek rozproszonych w danym kierunku przez rozwiązanie równania Schrödingera niezależnego od czasu.

W wersji niezależnej od czasu fala padająca jest opisana jako $\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{kr})$ i reprezentuje cząstki o pędzie $\hbar\mathbf{k}$. Fala rozproszona jest opisana funkcją kulistą $f(\theta,\phi)\frac{\exp(ikr)}{r}$; $f(\theta,\phi)$ nazywa się amplitudą rozproszenia. Równanie Schrödingera ma typową postać

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \tag{8}$$

Wymagany warunek brzegowy jest

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \sim_{r\to\infty} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) + f(\theta,\phi)\frac{\exp(ikr)}{r}. \tag{9}$$

Fala padająca spełnia równanie Schrödingera w nieobecności potencjału. Fala rozproszona spełnia to równanie asymptotycznie (kątowa część laplasjanu. która różniczkuje amplitudę rozproszenia, wchodzi z czynnikiem $\frac{1}{r^2}$ i szybko maleje dla dużych r). Takie zachowanie asymptotyczne wymaga założenia, że potencjał V maleje wystarczająco szybko przy r dążącym do nieskończoności. Warto podkreślić, że potencjał kulombowski maleje tylko jak $\frac{1}{r}$ i dla niego rozwiązania swobodne dla dużych r nie mają powyższej postaci.

Gęstość prądu dla cząstki opisanej dowolną funkcją ψ jest dana jako

$$\mathbf{j} = \frac{-i\hbar}{2m}[\psi^*\nabla\psi - (\nabla\psi^*)\psi]. \tag{10}$$

Wstawienie do powyższego wzoru fali padającej $\exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})$ daje gęstość prądu $\mathbf{j}_{pad} = \frac{\hbar\mathbf{k}}{m}$.

Pomiar jest przeprowadzany tak, że w znacznej odległości od centrum rozpraszającego stawia się detektor o powierzchnmi dS ustawionej prostopadle do wektora wodzącego $\mathbf{r}$. Potrzebna jest więc składowa radialna wektora gęstości prądu cząstek rozproszonych $j_r = \frac{\mathbf{r}}{r}\mathbf{j}$. Mamy

$$\frac{\mathbf{r}}{r}\nabla = \frac{x}{r}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{y}{r}\frac{\partial}{\partial y} + \frac{z}{r}\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial x}{\partial r}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial r}\frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial r}\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial r}. \tag{11}$$

Otrzymujemy więc

$$j_r = \frac{-i\hbar}{2m}[f^*\frac{\exp(-ikr)}{r}\frac{\partial}{\partial r}f\frac{\exp(ikr)}{r} - (\frac{\partial}{\partial r}f^*\frac{\exp(-ikr)}{r})f\frac{\exp(ikr)}{r}] = \frac{\hbar k}{mr^2}|f|^2. \tag{12}$$

Strumień cząstek rozproszonych skierowanych na powierzchnię dS wynosi więc $j_r dS = \frac{\hbar k}{mr^2}|f|^2 dS = \frac{\hbar k}{m}|f|^2 d\Omega$, gdzie $\frac{dS}{r^2} = d\Omega$ jest kątem bryłowym. Stosunek strumienia cząstek rozproszonych skierowanych na powierzchnię dS (czyli rozproszonych do kąta bryłowego $d\Omega$) do gęstości prądu cząsstek padających nazywa się różniczkowym przekrojem czynnym $d\sigma$

$$d\sigma = |f(\theta,\phi)|^2 d\Omega. \tag{13}$$

Jest to wielkość mająca miano powierzchni i charakteryzująca intensywność rozpraszania. Można podejrzewać, że jest rzędu rozmiarów cząstki rozpraszającej (tu będącej źródłem potencjału V), ale taka intuicja może być myląca. W fizyce cząstek elementarnych używa się jednostki 1 barn=10^{-28} m^2.

Celem teorii jest więc obliczenie amplitudy rozproszenia. Napiszmy równanie Schrödingera w postaci

$$(E - H_0)\psi_{\mathbf{k}} = V\psi_{\mathbf{k}}, \tag{14}$$

gdzie H_0 jest operatorem energii kinetycznej, lub zamiast tego równania

$$\psi_{\mathbf{k}} = \phi_{\mathbf{k}} + \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} V\psi_{\mathbf{k}}. \tag{15}$$

Równanie to jest znane jako równanie Lippmanna-Schwingera.

Aby operator odwrotny w powyższym równaniu istniał, należy określić sposób potraktowania osobliwości; tu dodano w mianowniku poprawkę urojoną o dowolnie małej dodatniej części urojonej ϵ - uzasadnienie poprawności tego postępowania pojawi się później. Po prawej stronie pojawił się wektor $\phi_{\mathbf{k}}$- wektor wektor własny H_0. który stanowiłby pełne rozwiązanie dla $V = 0$. W reprezentacji położeniowej równaie to ma postać

$$\langle \mathbf{r}|\psi_{\mathbf{k}}\rangle = \langle \mathbf{r}|\phi_{\mathbf{k}}\rangle + \langle \mathbf{r}|\frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} \int d^3r' |\mathbf{r}'\rangle\langle \mathbf{r}'|V\psi_{\mathbf{k}}\rangle, \tag{16}$$

lub po prostu

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + \int d^3r' \langle \mathbf{r}|\frac{1}{E - H_0 + i\epsilon}|\mathbf{r}'\rangle V(\mathbf{r}')\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}'); \tag{17}$$

$\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{kr})$. Operator $\frac{1}{E-H_0+i\epsilon}$ lub jego element macierzowy nazywa się operatorem (funkcją) Greena albo propagatorem. Pojawiła się ona przy zamianie równania różniczkowego na całkowe. Odpowiedni dobór funkcji Greena i rozwiązania swobodnego $\phi_{\mathbf{k}}$ gwarantują spełnienie właściwych warunków brzegowych.

Obliczenie funkcji Greena można przeprowadzić następująco. Wstawmy wewnątrz elementu macierzowego operator jednostkowy w postaci $\frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3q|\phi_{\mathbf{q}}\rangle\langle\phi_{\mathbf{q}}|$, biorą pod uwagę, że $\langle \mathbf{r}|\phi_{\mathbf{q}}\rangle = \exp(i\mathbf{qr})$. Otrzymamy

$$\langle \mathbf{r}|\frac{1}{E - H_0 + i\epsilon}|\mathbf{r}'\rangle = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3q \frac{\exp[i\mathbf{q}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')]}{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{\hbar^2 q^2}{2m} + i\epsilon}, \tag{18}$$

gdzie podstawiono $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ i wartość własną operatora H_0 dla funkcji $\phi_{\mathbf{q}}(\mathbf{r})$ w postaci $\frac{\hbar^2 q^2}{2m}$. Oznaczmy roboczo $\mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$. Otrzymamy

$$\langle \mathbf{r}| \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} |\mathbf{r}'\rangle = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{-2m}{\hbar^2} \int d^3q \frac{\exp[i\mathbf{q}\mathbf{R}]}{q^2 - k^2 - i\epsilon'} =$$
$$\frac{1}{(2\pi)^3} \frac{-2m}{\hbar^2} \int_0^\infty dq \int_0^\pi d\Theta \int_0^{2\pi} d\Phi \frac{\exp[iqR\cos\Theta]}{q^2 - k^2 - i\epsilon'} q^2 \sin\Theta, \quad (19)$$

gdzie wprowadzono współrzędne kuliste (q, Θ, Φ), a ϵ' formalnie różni się od ϵ o stały czynnik i też jest dowolnie małą stałą dodatnią. Całkę po Φ można wykonać natychmiast (daje 2π), a całkę po Θ wykonuje się podstawiając $\cos\Theta = u$. Wynik ma postać

$$\frac{1}{(2\pi)^2} \frac{-2m}{\hbar^2 iR} \int_0^\infty \frac{qdq}{q^2 - k^2 - i\epsilon'} [\exp(iqR) - \exp(-iqR)] \quad (20)$$

Ostatnia całka jest sumą dwóch całek, zawierających odpowiednio $\exp(iqR)$ i $\exp(-iqR)$. W drugiej z nich podstawia się $q' = -q$ i całka przyjmuje postać taką jak pierwsza, z tym że granice są od $-\infty$ do zera. Otrzymuje się więc

$$\frac{1}{(2\pi)^2} \frac{-2m}{\hbar^2 iR} \int_{-\infty}^\infty \frac{qdq}{q^2 - k^2 - i\epsilon'} \exp(iqR). \quad (21)$$

Ostatnią całkę można obliczyć traktując q jako zmienną zespoloną. Ponieważ $R > 0$ (poza jednym punktem) funkcja wykładnicza szybko zmierza do zera dla q leżących w górnej półpłaszczy znie gdy $|q| \to \infty$. Dlatego wartość całki po łuku promieniu dążącym do nieskończoności i kącie zmieniającym się od 0 do π zmierza do zera i ten łuk mżna bezkarnie dołożyć do osi rzeczywistej, zamykają kontur całkowania.

Funkcja podcałkowa posiada dwa bieguny: jeden w górnej półpłaszczyźnie w punkcie $q = k + i\eta$, drugi w dolnej półpłaszczy znie w punkcie $-k - i\eta$, gdzie η jest dowolnie małą liczbą dodatnią. Zastosowanie twierdzenia Cauchy'ego dla wspomnianej krzywej w górnej pó łpłaszczy,znie daje funkcję Greena

$$\langle \mathbf{r}| \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} |\mathbf{r}'\rangle = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{-2m}{\hbar^2 iR} 2\pi i \lim_{q \to k} (q - k) \frac{q}{q^2 - k^2 - i\epsilon'} \exp(iqR) =$$
$$\frac{-m}{2\pi\hbar^2} \frac{\exp[ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|]}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. (22)$$

Równanie całkowe przyjmuje wię postać

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + \frac{-m}{2\pi\hbar^2}\int d^3r' \frac{\exp[ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|]}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}')\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}'). \tag{23}$$

Ponieważ $\mathbf{r}'$, formalnie przebiegając całą przestrzeń, praktycznie wpływa na całką tylko w ograniczonym obszarze, gdzie $V(\mathbf{r}')$ jest istotnie różny od zera, podczas gdy r jest znacznie większe, Asymptotyczną postać funkcji falowej dla dużych r można napisać, przybliżając $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \approx r - \mathbf{r}'\frac{\mathbf{r}}{r}$ w liczniku i przez r w mianowniku. Stąd

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \sim_{r\to\infty} \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + \frac{\exp(ikr)}{r}\frac{-m}{2\pi\hbar^2}\int d^3r' \exp[-i\mathbf{k}'\mathbf{r}']V(\mathbf{r}')\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}'), \tag{24}$$

gdzie wektor $\mathbf{k}' = k\frac{\mathbf{r}}{r}$ jest wektorem falowym stanu po rozproszeniu: ma długość k i kierunek wektora wodzącego $\mathbf{r}$. Amplituda rozproszenia ma postać

$$f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = \frac{-m}{2\pi\hbar^2}\int d^3r' \exp[-i\mathbf{k}'\mathbf{r}']V(\mathbf{r}')\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}'). \tag{25}$$

Jeśli wektor k skierowany jest wzdłuż osi z, amplituda rozproszenia staje się funkcją kątów θ i ϕ.

Równanie Lippmanna Schwingera można poddać iteracji i uzyskać przybliżone rozwiązania. Istota przybliżenia polega na tym, że w zerowym przybliżeniu (trywialnym) rozwiązaniem jest sama fala padająca, a rozwiązanie w przybliżeniu n-tym otrzymuje się wstawiajcac pod całkę rozwiązanie uzyskane w przybliżeniu $n-1$-ym. Taki ciąg przybliżeń daje rozwiązanie w postaci szeregu, zwanego szeregiem, Borna, a kolejne kroki - pierwszym, drugim ... przybliżeniem Borna. Postępowanie takie może przybliżać ścisłe wyniki dla dużych energii zderzenia E, słabych potencjaów V i małych kątów rozpraszania. W pierwszym przybliżeniu Borna otrzymujemy amplitudę rozproszenia w postacci

$$f^{B1}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = \frac{-m}{2\pi\hbar^2}\int d^3r' \exp[-i\mathbf{k}'\mathbf{r}']V(\mathbf{r}')\exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}'). \tag{26}$$

Jako przykład weźmy ekranowany potencjał kulombowski, rozważany wcześniej. Amplituda rozproszenia w przybliżeniu Borna ma postać

$$f^{B1}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = \frac{-m}{2\pi\hbar^2}\int d^3r' \exp[-i\mathbf{k}'\mathbf{r}']\frac{Q_1Q_2}{4\pi\epsilon_0 r'}\exp(-\gamma r')\exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}'). \tag{27}$$

Całkowanie wykonuje się w zmiennych sferycznych r', θ', ϕ', przyjmując kierunek $\mathbf{k}-\mathbf{k}'$ jako øś z'. Wynik ma postać

$$f^{B1}(\mathbf{k}',\mathbf{k}) = \frac{-m}{2\pi\hbar^2}\frac{Q_1Q_2}{4\pi\epsilon_0}\frac{4\pi}{\gamma^2+(\mathbf{k}-\mathbf{k}')^2}. \tag{28}$$

Wyłączając ekranowanie kładzie się $\gamma = 0$. Wektory $\mathbf{k}$ i $\mathbf{k}'$ tworzą trójkąt równoramienny, a kąt pomiędzy nimi wynosi θ, $|\mathbf{k}-\mathbf{k}'| = 2k\sin\frac{\theta}{2}$. Przekrój czynny ma postać

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f^{B1}(\mathbf{k}',\mathbf{k})|^2 = (\frac{Q_1Q_2}{4\pi\epsilon_0})^2\frac{m^2}{4p^4\sin^4\frac{\theta}{2}}, \tag{29}$$

gdzie pęd $p = \hbar k$. Wzór ten znany jest jako wzór Rutherforda. Ciekawe, że jest to wynik ścisły (uzyskany w bardziej skomplikowanych kwantowych obliczeniach właściwych dla potencjału kulombowskiego), będący równocześnie identyczny z wynikiem obliczeń mechaniki klasycznej.

2 Zderzenia w jednym wymiarze

Dla zderzeń w jednym wymiarze formalizm powyższy przyjmuje uproszczoną formę, choć z pewnymi modyfikacjami. Równanie Lippmanna-Schwingera przyjmuje postać

$$\psi_k(x) = \exp(ikx) + \int dx'\langle x|\frac{1}{E-\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+i\epsilon}|x'\rangle V(x')\psi_k(x'). \tag{30}$$

Funkcję Greena pod całką mżna obliczyć podobnie jak w przypadku trójwymiarowym. Wstawmy pod całkę operator jednostkowy $\frac{1}{2\pi}\int dq|\phi_q\rangle\langle\psi_q|$, pamiętając, że $\langle x|\psi_q\rangle = \exp(iqx)$. Otrzymamy

$$\langle x|\frac{1}{E-\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+i\epsilon}|x'\rangle = \frac{1}{2\pi}\frac{-2m}{\hbar^2}\int dq\frac{\exp(iq(x-x'))}{q^2-k^2-i\epsilon'}, \tag{31}$$

gdzie $E = \frac{\hbar^2k^2}{2m}$, $k > 0$, a ϵ' jest dowolnie małca liczbą dodatnią (proporcjonalną o *epsilon*)). Bieguny funkcji podcałkowej leżą, jak poprzednio w pierwszej ćwiartce, powyżej wartości k, i w trzeciej ćwiartce, poniżej wartości $-k$. Należy teraz zamknąć kontur całkowania tak, aby nie zmienić wartości całki. Jeśli $x - x' > 0$, zamykamy kontur w górnej półpłszczyznie, bo na łuku funkcja podcałkowa zmierza do zera, i liczymy residuum w biegunie $q = k + i\eta$ (η też jest dowolnie małca liczbą dodatnią); sama całka ma wartość

$$2\pi i \exp[ik(x - x')]\frac{1}{2k}. \tag{32}$$

W przypadku $x - x' < 0$ należy zamkąć kontur w dolnej półpłaszczyznie i obliczyć residuum w $q = -k - i\eta$, dająwartość całki

$$-2\pi i \exp[-ik(x - x')]\frac{1}{-2k}. \tag{33}$$

Ostatecznie funkcja Greena daje się zapisać jako

$$\langle x|\frac{1}{E - \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + i\epsilon}|x'\rangle = \frac{-im}{\hbar^2 k}\exp(ik|x - x'|). \tag{34}$$

Równanie Lippmanna-Schwingera przybiera postać

$$\psi_k(x) = \exp(ikx) + \frac{-im}{\hbar^2 k}\int dx' \exp(ik|x - x'|)V(x')\psi_k(x'). \tag{35}$$

Wezmy szczególny przypadek potecjału typu delty Diraca $V(x) = \lambda\delta(x)$. W tym przypadku równanie przybiera postać

$$\psi_k(x) = \exp(ikx) + \frac{-im}{\hbar^2 k}\lambda \exp(ik|x|)\psi_k(0). \tag{36}$$

Dla $x > 0$ funkcja ma postać

$$\psi_k(x) = exp(ikx)[1 + \frac{-im}{\hbar^2 k}\lambda\psi_k(0)], \tag{37}$$

a dla $x < 0$

$$\psi_k(x) = \exp(ikx) + \frac{-im}{\hbar^2 k}\lambda \exp(-ikx)\psi_k(0). \tag{38}$$

Zmierzając z x do zera w dowolnym z powyższych 2 równań, otrzymujemy

$$\psi(0) = \frac{1}{1 + \frac{im\lambda}{\hbar^2 k}}. \tag{39}$$

Rozwiązanie swobodne $\exp(ikx)$ jest falą padającą. Amplituda fali odbitej wynosi

$$\frac{\frac{-im\lambda}{\hbar^2 k}}{1+\frac{im\lambda}{\hbar^2 k}}, \tag{40}$$

a amplituda fali przepuszczonej

$$\frac{1}{1+\frac{im\lambda}{\hbar^2 k}}. \tag{41}$$

Ponieważ amplituda fali padającej jest równa 1, kwadraty wartości bezwzględnych powyższych dwóch amplitud dają odpowiednie prawdopodobieństwa. Oczywiście wyniki te można także dostać bez odwoływania się do teorii funkcji Greena.

3 Ogólna postać funkcji Green w przypadku jednowymiarowym

Otrzymana wyżej postać funkcji Greena, właściwa do opisu zderzenia, należy do szerszej klasy funkcji Greena. Warunek definiujący funkcję Greena dla operatora energii można napisać w postaci

$$(E - \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} - V(x))G(x,x') = \delta(x-x'), \tag{42}$$

gdzie dopuszczono obecność jakiegoś potencjłu V w hamiltonianie. Dla operatora po lewej stronie można napisać równanie

$$(E - \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} - V(x))f(x) = 0, \tag{43}$$

Równanie różniczkowe drugiego rzędu ma dwa niezależne rozwiązania: $f(x)$ i $g(x)$. Okazuje się, całą klasę funkcji Greena można napisać w postaci

$$G(x,x') = Cf(x_>)g(x_<), \tag{44}$$

gdzie C jest stałą, którą wyznaczymy, a $x_< = min(x,x')$, $x_> = max(x,x')$ (odpowiednio mniejsza i większa z liczb x, x'. Zapisana inaczej funkcja Greena ma postać

$$G(x,x') = C[\Theta(x-x')f(x)g(x') + \Theta(x'-x)g(x)f(x')]. \tag{45}$$

$\Theta(x) = 1$ dla $x > 0$, 0 dla $x < 0$ i $\frac{1}{2}$ dla x=0. Pochodnej funkcji Θ można nadać sens badają ją pod całką z regularną funkcją F

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\Theta}{dx} F(x)dx = \Theta(x)F(x)|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \Theta(x)\frac{dF(x)}{dx}dx =$$
$$\Theta(x)F(x)|_{-\infty}^{\infty} - \int_{0}^{\infty} \frac{dF(x)}{dx}dx = F(\infty) - F(\infty) + F(0) = \int F(x)\delta(x)dx, \quad (46)$$

a więc można utożsamić $\frac{d\Theta}{dx}$ z deltą Diraca $\delta(x)$. Pochodna delty Diraca pod całką działa wyrzucając ujemną pochodną funkcji podcałkowej w zerze

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\delta(x)}{dx} F(x)dx = \delta(x)F(x)|_{-\infty}^{\infty} - \int \delta(x)\frac{dF(x)}{dx} = -\frac{dF(0)}{dx}. \quad (47)$$

Wstawiając postulowaną postać funkcji Greena do równania, jakie ma spełniać, i korzystają z faktu, że f i g są rozwiązaniami podanego wyżej równania, otrzymujemy

$$\begin{aligned}
&[E - \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} - V(x))]C[\Theta(x-x')f(x)g(x') + \Theta(x'-x)g(x)f(x')] = \\
&C\frac{\hbar^2}{2m}[\frac{d^2\Theta(x-x')}{dx^2}f(x)g(x') + \frac{d^2\Theta(x'-x)}{dx^2}g(x)f(x') + \\
&2\frac{d\Theta(x-x')}{dx}\frac{df(x)}{dx}g(x') + 2\frac{d\Theta(x'-x)}{dx}\frac{dg(x)}{dx}f(x') = \\
&C\frac{\hbar^2}{2m}[\frac{d\delta(x-x')}{dx}\{f(x)g(x') - g(x)f(x')\} + 2\delta(x-x')\{\frac{df(x)}{dx}g(x') - \frac{dg(x)}{dx}f(x')\}].
\end{aligned} \quad (48)$$

Wyraz z pochodną delty Diraca można zbadać pod całką z dowolną regularną funkcją $F(x)$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\delta(x-x')}{dx}\{f(x)g(x') - g(x)f(x')\}F(x)dx = -\frac{d}{dx}\{f(x)g(x') - g(x)f(x')\}F(x)|_{x=x'}$$
$$-[\frac{df(x)}{dx}g(x) - \frac{dg(x)}{dx}f(x)]F(x) = -\int \delta(x-x')[\frac{df(x)}{dx}g(x') - \frac{dg(x)}{dx}f(x')]F(x)dx. \quad (49)$$

Wyraz z pochodnymi funkcji delta daje więc wkład o połowę mniejszy i z przeciwnym znakiem niż wyraz z $2\delta(x)$. Stąd

$$[E - \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} - V(x))]C[\Theta(x-x')f(x)g(x') + \Theta(x'-x)g(x)f(x')] =$$
$$C\frac{\hbar^2}{2m}\delta(x-x')\{\frac{df(x)}{dx}g(x') - \frac{dg(x)}{dx}f(x')\}. \quad (50)$$

Ostatnie wyrażenie ma być równe $\delta(x-x')$.Tak będzie, jeśli

$$C\frac{\hbar^2}{2m}\{\frac{df(x)}{dx}g(x)-\frac{dg(x)}{dx}f(x)\}=1. \tag{51}$$

Funkcja w nawiasie klamrowym nosi nazwę wyznacznika Wrońskiego.

$$W(g,f)=\det\begin{pmatrix} g(x) & f(x) \\ \frac{dg(x)}{dx} & \frac{df(x)}{dx}\end{pmatrix}. \tag{52}$$

Łatwo sprawdzić, że tu $W(g,f)$ jest stałą¿ Istotnie, napiszmy równania

$$(E-\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}-V(x))f(x)=0,$$
$$(E-\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}-V(x))g(x)=0. \tag{53}$$

Pomnóżmy pierwsze z równań przez $g(x)$, a drugie przez $f(x)$ i odejmijmy stronami. Otrzymamy

$$f''g-fg''=(f'g-fg')'=0, \tag{54}$$

a więc wyznacznik Wrońskiego jest stały. Stąd stała $C=\frac{2m}{\hbar^2 W(g,f)}$. Niezerowanie się wyznacznika Wrońskiego jest wyrazem niezależności rozwiązań f i g.

Funkcja Greena otrzymana do opisu zderzenia jest tej postaci, jeśi położymy $f(x)=\exp(ikx)$, $g(x)=\exp(-ikx)$.

Inną klasę funkcji Greena otrzymamy, np. odejmując od otrzymanej wyżej funkcji Greena rozwiązanie $Cf(x)g(x')$

$$\tilde{G}(x,x')=Cf(x_>)g(x_<)-Cf(x)g(x')=C\Theta(x'-x)[g(x)f(x')-f(x)g(x')]. \tag{55}$$