**Elementy teorii rozpraszania** (elastycznego)

W klasycznej teorii problem rozpraszania (zderzenia) cząstek o masach $m_1$ i $m_2$ z oddziaływaniem opisanym potencjałem V(**r**), sprowadza się do problemu rozpraszania cząstki o masie zredukowanej $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1+m_2}$ w polu potencjalnym V(**r**).

Zagadnienie stacjonarne (zamiast rozpatrywania procesu w czasie) – energia układu jako całości nie ulega zmianie.

Problem:

zakładamy *ciągły* strumień cząstek padających [na obszar oddziaływania V(**r**) ] i badamy strumień cząstek rozbiegających się pod różnymi kątami;

zadanie: znalezienie *różniczkowego przekroju czynnego* =

$$d\sigma(\theta,\varphi) = \frac{liczba\ czastek\ rozproszonych\ w\ j.czasu\ w\ kąt\ bryłowy\ d\Omega}{gęstość\ strumienia\ cząstek\ padających}$$

gdzie $d\Omega = \sin\theta\, d\theta\, d\varphi$.

Cząstki padające [o masie $\mu$] ( a zatem i rozproszone) mają E > 0; opisująca je funkcja falowa spełnia [1]

$$(\nabla^2 + k^2)\psi(\mathbf{r}) = \frac{2\mu}{\hbar^2} V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})$$

gdzie $k^2 = \frac{2\mu}{\hbar^2}E$ i ma rozwiązanie dla każdego $E > 0$.

Załóżmy, że V(**r**) spełnia w przybliżeniu

$$V(\mathbf{r}) \begin{Bmatrix} = 0, & |\mathbf{r}| > d \\ \neq 0, & |\mathbf{r}| \leq d \end{Bmatrix}$$

*d* – obszar oddziaływania

na zewnątrz tego obszaru rozwiązaniami [1] są fale płaskie

$$\varphi_a(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}_a\mathbf{r}), \quad \mathbf{k}_a^2 = \mathrm{k}^2 \ , \ \ \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}_a$$

w szczególności jeśli założymy kierunek z strumienia cząstek padających [1*],

$$\varphi_a(\mathbf{r}) = \exp(ik_a z).$$

Gęstość strumienia cząstek padających (=gęstości prądu prawdopodobieństwa) $\varphi_a(\mathbf{r})$ jest równa prędkości cząstek padających (w ruchu względnym)

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

tutaj $\mathbf{j}_{\boldsymbol{a}} = \frac{\hbar k_a}{\mu}$.

Rozwiązania $\psi(\mathbf{r})$ równania [1] poszukuje się korzystając z tzw. formalizmu *funkcji Greena*, będącej rozwiązaniem równania [1a]

$$(\nabla^2 + \mathbf{k}^2)G(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}').$$

Ogólne rozwiązanie równania

$$(\nabla^2 + k^2)\phi(\mathbf{r}) = A(\mathbf{r})$$

można przedstawić w postaci

$$\phi(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r}) + \int G(\mathbf{r},\mathbf{r}')A(\mathbf{r}')d^3r' ,$$

[G jest jądrem operatora całkowego w równaniu całkowym – które zastępuje równanie różniczkowe [1] w poszukiwaniu rozwiązania $\psi(\mathbf{r})$ ]

i można pokazać, że rozwiązanie równania [1a] odpowiadające falom rozproszonym (wybiegającym z centrum) ma postać

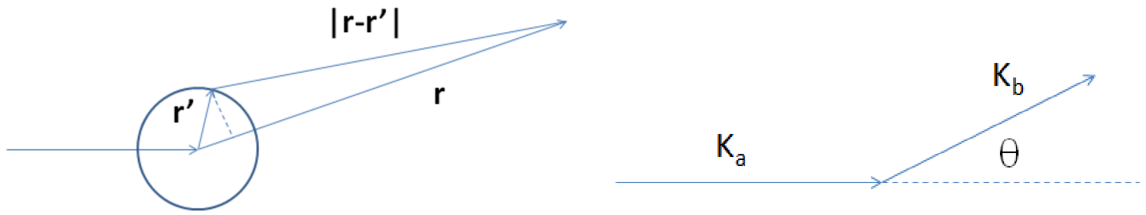
$$G_+(\mathbf{r},\mathbf{r}') = -\frac{\exp(ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|},$$

zatem [2]

$$\psi_a(\mathbf{r}) = \varphi_a(\mathbf{r}) - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int \frac{\exp(ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}V(\mathbf{r}')\psi_a(\mathbf{r}')d^3r'.$$

[rozwiązanie $\psi_a$ znajduje się również pod całką].

Dla dużych r>>d




$$k|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = kr - \mathbf{k_b}\mathbf{r}', \qquad \mathbf{k_b} = k\frac{\mathbf{r}}{r}$$

równanie [2] sprowadza się do [2a]

$$\psi_a(\mathbf{r}) = \varphi_a(\mathbf{r}) + A_{ba}\frac{e^{ikr}}{r} \; ,$$

gdzie

$$A_{ba} = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int \exp(-i\mathbf{k_b}\mathbf{r}')V(\mathbf{r}')\psi_a(\mathbf{r}')d^3r' \; ,$$

tzn.

$$A_{ba} = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\langle\varphi_b|V|\psi_a\rangle$$

a z uwagi na [1*]  zapisuje się [2a]  jako

$$\psi = e^{ikz} + \frac{f(\theta)}{r}e^{ikr}$$

dla V=V(*r*); pierwszy człon to fala padająca a drugi to fala rozproszona (*scat*);

$A_{ba}$ lub  f(θ)  nazywa się  *amplitudą rozpraszania;* (z kierunku padającego  „z”  w kierunek określony kątem rozproszenia  θ ,  albo z kierunku określonego pędem  $k_a$ w kierunku określonym przez pęd  $k_b$ .

Radialna gęstość strumienia odpowiadająca fali rozproszonej

$$j_r = \frac{\hbar}{2\mu i}\left(\psi^*_{scat}\frac{\partial\psi_{scat}}{\partial r} - \psi_{scat}\frac{\partial\psi^*_{scat}}{\partial r}\right) = \frac{\hbar k}{\mu r^2}|A_{ba}|^2$$

ale przez element powierzchni kąta bryłowego  $d\Omega$  przechodzi  $j_r r^2 d\Omega$  cząstek, zatem z definicji  $d\sigma$

$$d\sigma = \frac{k}{k_a}|A_{ba}|^2 d\Omega = |A_{ba}|^2 d\Omega$$

gdyż przy elastycznym rozpraszaniu  $k=k_a$ .

Gdy  V(r)  jest małe i można potraktować jako zaburzenie, to równanie [2] można rozwiązać metodą kolejnych przybliżeń:

$$\psi_a^{(k+1)}(\mathbf{r}) = \varphi_a(\mathbf{r}) - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int \frac{\exp(ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}V(\mathbf{r}')\psi_a^{(k)}(\mathbf{r}')d^3r'.$$

inaczej: [3]

$$\psi_a(\mathbf{r}) = \varphi_a(\mathbf{r}) - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int \frac{\exp(ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}')\varphi_a(\mathbf{r}')d^3r' + \cdots$$

i tym samym amplituda rozpraszania:

$$A_{ba} = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\langle\varphi_b|V|\varphi_a\rangle + \left(\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \int \varphi_b^*(\mathbf{r})\frac{\exp(ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(\boldsymbol{r})V(\mathbf{r}')\varphi_a(\mathbf{r}')d^3r d^3r' + \cdots$$

pozostawienie I-go wyrazu to tzw. przybliżenie Borna

$$A_{ba} = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\langle\varphi_b|V|\varphi_a\rangle$$

i [DS]

$$d\sigma^{(B)} = \left(\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\right)^2 |\langle\varphi_b|V|\varphi_a\rangle|^2\, d\Omega$$

Warunek stosowalności przybliżenia Borna.

Pozostawienie w [3] tylko jednego wyrazu jest dopuszczalne gdy

$$|\varphi_a(\mathbf{r})| \gg \left|\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int \frac{\exp(ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}')\varphi_a(\mathbf{r}')d^3r'\right|$$

ale |V(*r*)| jest na ogół największe w *r* = 0, gdzie $\varphi_a(\mathbf{r})$ jest skończone i < 1, zatem

$$1 \gg \left|\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int \frac{\exp(ikr)}{r} V(\mathbf{r})d^3r\right|,$$

pamiętając, że $k^2 = \frac{2\mu}{\hbar^2}E$ , małe energie oznaczają *kd* << 1 , exp – można zastąpić jedynką, zatem [4]

$$\bar{V} \ll \frac{\hbar^2}{2\mu d^2}, \qquad \bar{V} = \frac{1}{4\pi d^2}\left|\int \frac{1}{r}V(r)d^3r\right|.$$

Ale $\frac{\hbar^2}{2\mu d^2}$ można (za zasadą nieoznaczoności) uważać za „rząd" wartości energii kinetycznej swobodnej cząstki w obszarze o liniowych rozmiarach *„d"* , zatem warunek [4] oznacza, że:

**energia kinetyczna cząstki musi być znacznie większa od energii potencjalnej.**

Metoda fal parcjalnych

Jeśli V(**r**) = V(*r*) [centralny potencjał o symetrii kulistej], wówczas moment pędu jest stałą ruchu [H,$l^2$]=0, tzn. stany określone jako własne $l^2$ uczestniczą w procesie rozpraszania niezależnie (nie mieszają się;

zarówno funkcję opisującą stany cząstek padających, $\varphi_a(\mathbf{r})$, jak i i całą funkcję $\psi(\mathbf{r})$ możemy przedstawić w postaci kombinacji liniowej (superpozycji) fal odpowiadających różnym wartościom momentu pędu

dla fali padającej w kierunku z : [15]

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

gdzie $j_l(kr)$ - sferyczne funkcje Bessela, które są rozwiązaniami równania dla Schrödingera dla cząstki swobodnej, ale o określonej wartości orbitalnego mementu pędu [którego radialna część ma postać] [15a]

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2\right) R(r) = 0\,,$$

pamiętając, że $k^2 = \frac{2\mu}{\hbar^2} E$, *E* musi być dodatnia i nakładając warunek skończoności funkcji *R*(r) w r=0;

pozostałe wyrazy w [15] to współczynniki rozwinięcia fali płaskiej na *fale kuliste Bessela*, - [przejście z bazy fal kulistych do fal płaskich].

Asymptotycznie dla dużych *r* funkcje Bessela

$$j_l(kr) \approx \frac{\sin\left(kr - \frac{1}{2} l\pi\right)}{kr}$$

zatem [15b]

$$\varphi_a(\mathbf{r}) \approx (kr)^{-1} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l\, P_l(\cos\theta)\, \rho_l(r)$$

gdzie $\rho_l(r) = \sin\left(kr - \frac{1}{2} l\pi\right) = \frac{i}{2}\{e^{-i\left(kr - \frac{1}{2} l\pi\right)} - e^{i\left(kr - \frac{1}{2} l\pi\right)}\}$.

Pierwszy człon odpowiada falom kulistym *schodzącym się* do r=0, a drugi falom *rozchodzącym się* [*wychodzącym*].

Rozwiązania równania [1] też można szukać w takiej postaci [15c]

$$\psi(\mathbf{r}) = (kr)^{-1} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l \, P_l(\cos\theta) \, R_l(r)$$

przy czym $R_l(r)$ spełniają [15d]

$$\left( \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 \right) R_l(r) = \frac{2\mu}{\hbar^2} \, V(r) R_l(r),$$

z warunkiem brzegowym $R_l(0) = 0$.

Łatwo sprawdzić, że dla V(r) ~ 1/r dla $r \to 0$, $R_l$ które można przedstawić w postaci szeregu potęgowego $ar^n(1 + br + cr^2 + \cdots)$, musi sią zachowywać w $r \to 0$ jak $r^{l+1}$

Z fizycznego punktu widzenia możemy powiedzieć, że oddziaływanie cząstek z V zmieni w asymptotycznej postaci funkcji $\psi$ amplitudę (wkład) fal *rozchodzących się* (rozproszonych), zatem możemy zapisać, że asymptotycznie dla dużych *r* : [16]

$$R_l(r) = \frac{i}{2} \left\{ e^{-i\left(kr - \frac{1}{2} l\pi\right)} - S_l e^{i\left(kr - \frac{1}{2} l\pi\right)} \right\} =$$

$$= \sin\left(kr - \tfrac{1}{2} l\pi\right) + \frac{i}{2} (-i)^l (1 - S_l) e^{ikr}$$

$S_l$ – nazywa się *diagonalnymi elementami macierzy rozpraszania* [z bardziej ogólnej teorii zderzeń nieelastycznych]; można sprowadzić do *przesunięć fazowych*

$$S_l = \exp(2i\delta_l).$$

[ale trzeba ujednoznacznić przedział, np. do ($-\pi/2$, $+\pi/2$) ].

Wstawiając [16] do [15c] dostaniemy (dla $kr \gg l$ )

$$\psi(r) \approx \varphi_a(r) + A(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \; ,$$

gdzie

$$A(\theta) = \frac{i}{2k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(1 - S_l) \, P_l(\cos\theta)$$

Postępowanie:

- dla zadanego V(r) , rozwiązujemy [15d] dla kolejnych $l$ , z zadanym warunkiem brzegowym w r=0,

- każde $R_l(r)$ przyrównujmy asymptotycznie (dla dużych r) do postaci [16] i wyznaczamy $S_l$ ;

- obliczamy $A(\theta)$ a następnie przekrój czynny z [DS].

Łatwo jest znaleźć wyrażenie na całkowity przekrój czynny; pamiętając, że $|A|^2=A^*A$ oraz wyrażając $1-S_l=1-\exp(2i\delta_l)$ jako $1-S_l=-2i\exp(i\delta_l)\sin\delta_l$ [ze związków trygonometrycznych]

dostajemy

$$|A(\theta)|^2=\frac{1}{k^2}\sum_{l,l'}(2l+1)(2l'+1)P_l(\cos\theta)\,P_{l'}(\cos\theta)\sin\delta_l\sin\delta_{l'}\cos(\delta_l-\delta_{l'})$$

a całkując po kątach i pamiętając, że

$$\int P_l(\cos\theta)\,P_{l'}(\cos\theta)d\Omega=\frac{4\pi}{2l+1}\delta_{l,l'}$$

dostajemy całkowity przekrój czynny

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

W praktyce suma musi być skończona (przy sprawdzeniu, że jest zbieżna).