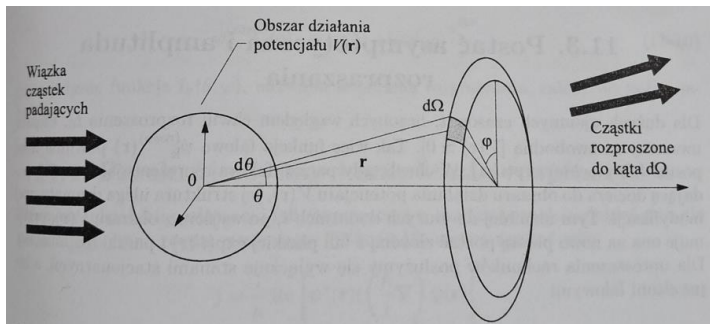


## Wstęp do kwantowej teorii rozpraszania

### I. Rozpraszanie przez statyczny potencjał



(LA, Mechanika kwantowa)

Założymy krótko-zasięgowy i sferycznie-symetryczny potencjał rozpraszający  $V(\mathbf{r}) = V(r)$  – układ współrzędnych w środku potencjału ; równanie Schroedingera [**stacjonarne zagadnienie własne** dla hamiltonianu cząstki w potencjale  $V(r)$  ], w jednostkach atomowych

(1)

$$\left[ -\frac{1}{2} \nabla^2 + V(r) \right] \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r})$$

równanie może mieć rozwiązania odpowiadające stanom związanym cząstki (elektronu) w potencjale  $V(r)$  ;

założymy  $V(r) \rightarrow 0$ , dla  $r \rightarrow \infty$  ;

nas interesuje przypadek  $E > 0$  , czyli w obszarze widma ciągłego energii – wszystkie  $E$  dozwolone; nie szukamy  $E$ , lecz:

badamy prawdopodobieństwo rozproszenia cząstki padającej z kierunku  $z$ , w kąt bryłowy  $d\Omega$ , określony przez  $\theta, \phi$  ; czyli przechodzących przez powierzchnię  $dS = r^2 d\Omega$  ;

to prawdopodobieństwo nazywamy **różniczkowym przekrojem czynnym**  $\sigma(\theta)$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\text{gęstość prądu fali rozproszonej (w } d\Omega \text{)}}{\text{gęstość prądu fali padającej (w jedn. pow.)}}$$

Dla sferycznie symetrycznego  $V(r)$  i elektronów padających opisanych falą płaską  $\sim e^{ikr}$  , gdzie  $k^2 = 2E$  , możemy dla dużych  $r$  przybliżyć  $\psi(\mathbf{r})$  jako

(2a)

$$\psi(\mathbf{r}) \sim e^{ikr} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}$$

a dla kierunku padania cząstek z

(2)

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

$$r \rightarrow \infty$$

a  $f(\theta)$  nazywamy amplitudą rozpraszania (zależy od  $E$ );

[uwaga: formalnie  $f(\theta)$  może zależeć też od  $\phi$ , ale dla sferycznie-symetrycznego potencjału  $V(r)$  i wiązce cząstek padających w kierunku z, hamiltonian jest niezmienniczy wzgl. obrotów wokół osi z];

gęstość prądu prawdopodobieństwa przechodząca przez  $d\mathbf{S}$  to

$$\mathbf{j} \cdot d\mathbf{S} = \frac{1}{2i} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \cdot d\mathbf{S}$$

gęstość prądu fali padającej to  $k$ ,

a obliczając gęstość fali rozproszonej,

dla  $r \rightarrow \infty$  można w gradiencie zostawić tylko składową radialną  $\nabla_r = \frac{\partial}{\partial r}$  i

przy pominięciu wyrazów  $\sim 1/r^3$ , jako małych w porównaniu z wyrazami  $\sim 1/r^2$  dostaniemy

$$\mathbf{j} \cdot d\mathbf{S} = \frac{k|f(\theta)|^2}{r^2} r^2 d\Omega$$

i ostatecznie

(2c)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2$$

a całkowity przekrój czynny otrzymujemy (po wycałkowaniu po  $\phi$  i  $\theta$ ):

$$\sigma = 2\pi \int_0^\pi |f(\theta)|^2 \sin\theta d\theta$$

### Analiza fal parcyjnych

Ze względu na osiową (z) symetrię funkcję  $\psi$  można rozłożyć na zupełny układ wielomianów Legendre'a  $P_l(\cos\theta)$

(3)

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} \sum_{l=0}^{\infty} A_l(k^2) u_l(r) P_l(\cos\theta)$$

gdzie  $A_l$  to współczynniki rozwinięcia,

lub zapisać jako

(3b)

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

wstawiając (3) do (1), mnożąc przez  $P_l^*(\cos\theta)$ , całkując po  $\theta$  i pamiętając, że wielomiany  $P_l$  są funkcjami własnymi operatora  $\mathbf{L}^2$ ,

$$\mathbf{L}^2 P_l(\cos\theta) = l(l+1) P_l(\cos\theta)$$

a operator Laplace'a we współrzędnych sferycznych ma postać

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \left( \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right)$$

gdzie część zależna tylko od kątów to  $\mathbf{L}^2$

dostaniemy równania na  $u_l(r)$

(4)

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

gdzie  $U(r) = 2V(r)$ .

Funkcje  $u_l(r)$  i  $R_l(r)$  spełniają to samo równanie (3) gdyż różnią się tylko stałym czynnikiem.

Podobnie jak dla stanów związanych atomów (np. wodoru) gdzie  $U(r) \sim \frac{1}{r}$ , możemy w  $r \rightarrow 0$  rozwinąć  $u_l(r) \sim r^n$ , i żądając regularności w  $r = 0$ , dostajemy (z równania 4) dwa możliwe zachowania:

$$u_l(r) \sim r^{l+1}, \quad \text{lub} \quad u_l(r) \sim r^{-l}$$

ale dla wszystkich dodatnich wartości  $l$  skończoną gęstość w  $r = 0$  daje tylko  $u_l(r) \sim r^{l+1}$  (rozwiązanie mające sens fizyczny).

Dla  $r \rightarrow \infty$ , gdzie  $V(r) \rightarrow 0$ , mamy

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

którego rozwiązaniami są powiązane ze sferycznymi funkcjami Bessela  $j_l$  i von Neumanna  $\eta_l$

(4a)

$$kr j_l(kr) \sim \sin\left(kr - \frac{1}{2}l\pi\right), \quad kr \eta_l(kr) \sim \cos\left(kr - \frac{1}{2}l\pi\right)$$

$$r \rightarrow \infty$$

i każde rozwiązanie może być przedstawione jako kombinacja

(5a)

$$u_l(r) = kr[a \cdot j_l(kr) + b \cdot \eta_l(kr)]$$

przy  $|a|^2 + |b|^2 = 1$ , można przedstawić  $a$  i  $b$  jako  $\cos \delta$  i  $\sin \delta$ ; i korzystając ze wzoru na  $\sin(\alpha + \beta)$ , dostaniemy asymptotycznie

(5b)

$$u_l(r) \sim \sin\left(kr - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l\right)$$

a  $\delta_l$  nazywamy przesunięciem fazowym  $l$ -tej fali parcjalej.

Ponieważ falę płaską  $e^{ikz}$  będącą funkcją opisującą elektrony padające też można przedstawić w postaci rozwinięcia

(6a)

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

albo jako

$$e^{ikz} = \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l q_l(r) P_l(\cos\theta)$$

przy czym asymptotyczna postać  $q_l(r)$  jest

(6b)

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

[gdyż  $e^{i\alpha} = \cos \alpha + i \sin \alpha$ ].

Jeśli chodzi o funkcje  $R_l(r)$  [czy  $u_l(r)$ ] to asymptotycznie, dla dużych  $r$ , będą one zawierały zarówno wkłady od fali padającej  $e^{ikz}$ , jak i od rozproszonej  $e^{ikr}$ ; jednak asymptotycznie amplituda kulistych fal rozproszonych będzie inna niż padających ze względu na oddziaływanie z potencjałem  $V(r)$ , zatem możemy **dla dużych  $r$**  przedstawić  $R_l(r)$  jako

(7)

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

[tu trzeba skorzystać z faktu, że (6b) można zapisać

w postaci  $\frac{i}{2} e^{-i(kr - \frac{1}{2}l\pi)} = \sin\left(kr - \frac{1}{2}l\pi\right) + \frac{i}{2} e^{i(kr - \frac{1}{2}l\pi)}$  a drugi wyraz to  $\frac{i}{2} e^{ikr} (-i)^l$

oraz z tego, że  $e^{-i\frac{l\pi}{2}} = (-i)^l$ ];

$S_l$  nazywa się macierzą rozpraszania (tu: diagonalnym elementem macierzy rozpraszania); w rzeczywistości jest to stosunkiem amplitudy fali wychodzącej do amplitudy fali przychodzącej;  
w postaci prawdziwie macierzowej pojawia się w rozpraszaniu nieelastycznym - wielokanałowym (na atomach), w którym cząstka padająca może wzbudzać atom do różnych stanów (o tym później).

Wstawiając (6a) [z asymptotyczną postacią (6b)] do (2) i porównując wyrazy szeregu (3) [z asymptotyczną postacią  $R_l(r)$  (7) ]

(7a)

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

$$f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} = \frac{1}{kr} \sum_l (2l+1)(i)^l P_l[R_l - krj_l]$$

co asymptotycznie

z (7) daje (podstawiając (4a) )

$$f(\theta)e^{ikr} = \frac{1}{k} \sum_l (2l+1)(i)^l P_l \left[ \sin\left(kr - \frac{1}{2}l\pi\right) + \frac{i}{2}(-i)^l(1 - S_l)e^{ikr} - \sin\left(kr - \frac{1}{2}l\pi\right) \right]$$

czyli

(8)

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(S_l - 1)P_l(\cos\theta)$$

gdyż  $(i)^l(-i)^l = 1^l = 1$ .

A z drugiej strony, asymptotyczna postać  $u_l(r)$

$$u_l(r) \sim \sin\left(kr - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l\right)$$

$$\sin(kr - l\pi/2 + \delta_l) = \frac{i}{2} \left( e^{-i(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l)} - e^{i(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l)} \right) = \frac{i}{2} e^{-i\delta_l} (e^{-i(kr - \frac{l\pi}{2})} - e^{i(kr - \frac{l\pi}{2})} e^{2i\delta_l})$$

oznacza [przez porównanie z (7)], że

(8a)

$$S_l = e^{2i\delta_l}, \quad \text{czyli} \quad S_l - 1 = 2ie^{i\delta_l} \sin \delta_l$$

[ skorzystałem z wzorów na  $\sin(2a)=2\sin(a)\cos(a)$  i  $\cos(2a)=\cos^2(a)-\sin^2(a)$  ]

zatem

(8b)

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(e^{2i\delta_l} - 1)P_l(\cos\theta).$$

Ponieważ  $\int |P_l(\cos\theta)|^2 d\Omega = \frac{4\pi}{2l+1}$

to całkowity przekrój czynny  $\sigma = 2\pi \int_0^\pi |f(\theta)|^2 \sin\theta d\theta$

wyniesie

(9)

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

Uwaga: wielkość  $1 - S_l = T$  nazywa się macierzą przejścia (*transition*);

w asymptotycznej postaci

$$\begin{aligned} u_l(r) &\sim \sin\left(kr - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l\right) \sim \sin\left(kr - \frac{1}{2}l\pi\right) + \tan \delta_l \cos\left(kr - \frac{1}{2}l\pi\right) \\ &= \sin\left(kr - \frac{1}{2}l\pi\right) + R \cos\left(kr - \frac{1}{2}l\pi\right) \end{aligned}$$

$\tan \delta_l$  nazywamy macierzą **R** (*reactance*) – tutaj jest skalarem,

proste przekształcenia prowadzą do związku  $S = \frac{1+iR}{1-iR}$ .

### Obliczenia w praktyce

Żeby obliczyć różniczkowy i całkowity przekrój czynny należy znaleźć wszystkie  $\delta_l$ ; numerycznie całkuje się równanie (4) w obszarze  $r < r_0$  dla każdego  $l$  oddzielnie (lub wyznacza się analityczną funkcję przybliżoną w tym obszarze) i zsywa się dla  $r \geq r_0$ , (gdzie  $r_0 = d$  to odległość, dla której  $U(r)$  w (4) jest do zaniedbania) z asymptotyczną postacią (5a),  $\delta_l$  wyznacza się z warunków zszycia.

Uwaga: W praktyce zwykle tylko skończona ilość  $\delta_l$  wnosi istotny wkład do sumy po  $l$ , co widać z równania (4), gdyż dla dużych  $l$  wyraz  $\frac{l(l+1)}{r^2}$  „zdominuje” potencjał  $U(r)$  – odpowiedzialny za rozproszenie i  $\delta_l$ .

Ciągłość funkcji i pochodnej można zapewnić poprzez żądanie ciągłości pochodnej

logarytmicznej  $(\ln R(r))' = \frac{R'}{R}$ ;

jeśli  $\gamma_l$  to pochodna logarytmiczna w punkcie  $r=d$  rozwiązania za obszaru  $r < d$ , to z (5a) dostajemy

$$\frac{k[j'_l(kd) \cos \delta_l + \eta'_l(kd) \sin \delta_l]}{[j_l(kd) \cos \delta_l + \eta_l(kd) \sin \delta_l]} = \gamma_l$$

wzór ten często upraszcza się dla szczególnych przypadków „silnego”  $U(r)$ , małych energii, lub dużych wartości  $l$ ; np. w odległości  $r \gg d$  od centrum rozpraszającego energia w równaniu (4) jest praktycznie określona przez potencjał odśrodkowy  $\frac{l(l+1)}{r^2} \sim k^2$  i

wyznaczone stąd  $r_{0l} = \frac{1}{k} \sqrt{l(l+1)}$  nazywa się „odległością największego zbliżenia” (klasycznie *parametrem zderzenia*);

innymi słowy: fale parcjalne o  $\sqrt{l(l+1)} \gg kd$ , (czyli w przybliżeniu o  $l \gg kd$ ), nie ulegają „rozproszeniu” – nie wnoszą istotnego  $\delta_l$ ;

dla  $l = 0$ ,  $kd \ll 1$  mówimy o *rozpraszaniu cząstek powolnych*.

Analizując  $f(\theta)$  dla  $\theta = 0$ , czyli „ku przodowi” (w kierunku padającej fali) dostajemy [z (8) i (8a)]

$$\text{Im}f(0) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l$$

a zatem z (9)

$$\sigma = \frac{4\pi}{k} \text{Im}f(0)$$

co nosi nazwę *twierdzenia optycznego*.