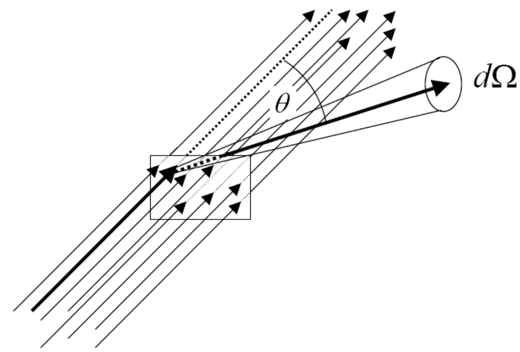
<u>Wykład XVII</u> Mechanika kwantowa

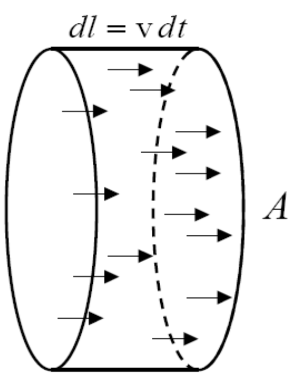
<u>Przekrój czynny i amplituda rozpraszania</u>

Rozważamy sytuację, kiedy wiązka cząstek pada na próbkę materiału – tarczę i tory cząstek ulegają zakrzywieniu. Definiujemy <u>różniczkowy przekrój czynny</u> $\frac{d\sigma}{d\Omega}$, określając prawdopodobieństwa na jednostkę czasu $P(\Omega)d\Omega$ zarejestrowania cząstki w kącie bryłowym $d\Omega$ rozproszonej pod kątem $\Omega = (\theta, \varphi)$:



$$P(\Omega)d\Omega = S\,n\frac{d\sigma}{d\Omega}d\Omega\,,$$

gdzie n jest liczbą centrów rozpraszania w tarczy, a S jest strumieniem cząstek wiązki, czyli liczbą cząstek padających na powierzchnię prostopadłą do kierunku wiązki w jednostce czasu.

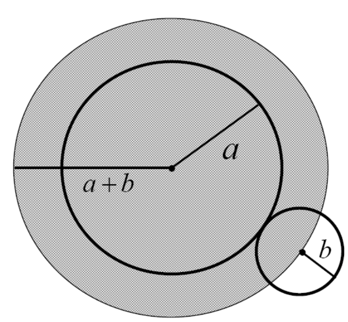


Jak pokazuje rysunek, liczba cząstek dN, które trafiają w powierzchnię A w czasie dt, jest równa $dN = \rho A \,\mathrm{v}\, dt$, gdzie ρ jest gęstością cząstek, a v ich prędkością prostopadłą do powierzchni. A ponieważ $S \equiv \frac{1}{A}\frac{dN}{dt}$, znajdujemy strumień jako

$$S = \rho\,\mathrm{v}\,.$$

Różniczkowy przekrój czynny $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ ma wymiar powierzchni. Jeśli trafi w nią cząstka wiązki, ulega rozproszeniu w kąt bryłowy $d\Omega$. Wielkość $\sigma \equiv \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega}$, to <u>całkowity przekrój czynny</u> równy powierzchni, w którą musi trafić cząstka by ulec rozproszeniu w jakikolwiek kąt.

Rozważmy klasyczne zderzenie cząstek o promieniach a i b. Jak wynika z rysunku całkowity przekrój czynny na oddziaływanie tych cząstek to $\sigma = \pi(a+b)^2$, tzn. środek cząstki, powiedzmy, o promieniu b musi trafić w powierzchnię $\sigma = \pi(a+b)^2$, aby doszło do zderzenia.



Wykład XVII cd. Mechanika kwantowa

Kwantowo-mechaniczna definicja przekroju czynnego

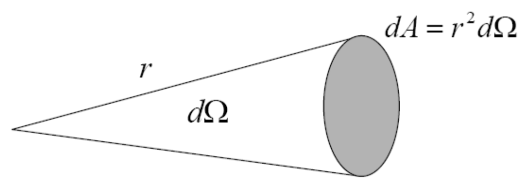
Problem rozpraszania rozważamy w układzie centrum masy systemu pocisk-tarcza. Ponieważ zakładamy nieobecność sił zewnętrznych, mamy do czynienia z cząstką o masie zredukowanej układu pocisk-tarcza poruszającej w potencjale reprezentującym oddziaływanie wzajemne. Przyjmujemy, że cząstki padające na tarczę poruszają się wzdłuż osi z i postulujemy, że funkcja falowa cząstek padających i rozproszonych ma na dużych odległościach od tarczy przybiera następującą postać asymptotyczną

$$\varphi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}}\left(e^{ikz} + f(\Omega)\frac{e^{ikr}}{r}\right),$$

gdzie $k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ jest wektorem falowym cząstki o energii E i masie m. Człon e^{ikz} odpowiada fali padającej, $\frac{e^{ikr}}{r}$ jest kulistą falą rozproszoną, $f(\Omega)$ to amplituda rozpraszania, $\sqrt{V}$ jest czynnikiem wynikającym z „normalizacji w pudełku". Widzimy, że amplituda rozpraszania ma wymiar długości.

Prawdopodobieństwo rozproszenia cząstki na jednostkę czasu w kąt bryłowy $d\Omega$ równe jest

$$P(\Omega)d\Omega = Nn\mathrm{v}\left|\varphi_s(\mathbf{r})\right|^2 r^2 d\Omega,$$



gdzie N i n są, odpowiednio liczbą cząstek padających i cząstek tarczy, v jest prędkością względną, $\varphi_s(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} f(\Omega)\frac{e^{ikr}}{r}$ częścią funkcji falowej odpowiadającą fali rozproszonej, a $r^2 d\Omega$ powierzchnią podstawy stożka pokazanego na rysunku. Ponieważ

$P(\Omega)d\Omega = \rho n \mathrm{v}\frac{d\sigma}{d\Omega}d\Omega$, mamy $\frac{N}{V}n\mathrm{v}\left|f(\Omega)\right|^2 r^2 d\Omega = \rho n\mathrm{v}\frac{d\sigma}{d\Omega}d\Omega$ czyli

$$\boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left|f(\Omega)\right|^2.}$$

Wykład XVII cd. Mechanika kwantowa

Dalej będziemy zakładać, że, tak jak się dzieje w przypadku potencjałów sferycznie symetrycznych, prawdopodobieństwo rozpraszania nie zależy od kąta azymutalnego φ. Wówczas $f(\Omega) = f(\theta)$, a

$$\sigma \equiv \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega} = 2\pi \int_0^\pi d\theta \sin\theta |f(\theta)|^2 = 2\pi \int_{-1}^{1} d(\cos\theta) |f(\theta)|^2 .$$

Rozkład na fale parcjalne

Przyjmujemy, że potencjał oddziaływania jest sferycznie symetryczny, więc funkcję falową można zapisać w postaci

$$\varphi(r,\theta,\varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} C_{lm} R_l(r) Y_{lm}(\theta,\varphi) ,$$

gdzie $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ to harmoniki sferyczne. Skoro przyjęliśmy, że rozpraszanie nie zależy od kąta azymutalnego φ, więc jedyną dopuszczalna wartością m jest $m = 0$. Ponieważ $Y_{l0}(\theta,\varphi) \sim P_l(\cos\theta)$, gdzie $P_l(\cos\theta)$ jest wielomianem Legendre'a, rozkład funkcji falowej przyjmuje postać

$$\varphi(r,\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} C_l R_l(r) P_l(\cos\theta) .$$

Rozkład danej wielkości na sumę wkładów o określonych l nosi nazwę rozkładu na fale parcjalne.

Gdy zasięg potencjału jest skończony, równanie Schrödingera dla dużych r jest równaniem swobodnym. Rozwiązanie takiego równania we współrzędnych sferycznych zapisujemy jako

$$\varphi(r,\theta,\varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} C_{lm} R_l(r) Y_{lm}(\theta,\varphi) ,$$

gdzie radialna część funkcji falowej równa jest

$$R_l(r) = A_l j_l(kr) + B_l n_l(kr) ,$$

przy czym $j_l(x)$ i $n_l(r)$ to tzw. sferyczne funkcje Bessela, które dla $x >> l(l+1)$ można przybliżyć jako

$$j_l(x) \approx \frac{1}{x} \sin\left(x - \frac{\pi l}{2}\right), \quad n_l(x) \approx -\frac{1}{x} \cos\left(x - \frac{\pi l}{2}\right).$$

Tak zatem radialną część funkcji falowej, opisującej rozpraszanie na potencjałach o skończonym zasięgu, zapisujemy jako

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

Powyższy wzór można traktować jako definicję przesunięcia fazowego δ_l .

Funkcja falowa przyjmuje postać

$$\begin{aligned}\varphi(r,\theta) &= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{C_l}{kr}\sin\left(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l\right)P_l(\cos\theta) \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{C_l}{2ikr}P_l(\cos\theta)\left(\exp\left(ikr - \frac{i\pi l}{2} + i\delta_l\right) - \exp\left(-ikr + \frac{i\pi l}{2} - i\delta_l\right)\right).\end{aligned} \qquad (*)$$

Uwaga: Ściśle rzecz biorąc powyższy wzór, który występuje bodaj we wszystkich podręcznikach mechaniki kwantowej, jest matematycznie niepoprawny, gdyż przy sumowaniu po l do nieskończoności następuje w którymś momencie naruszenie warunku $kr >> l(l+1)$. Jednak wyprowadzenia wykorzystujące takie (rozbieżne) szeregi są poprawne, jeśli nie wykonywane jest sumowanie po l, a rozważane są jedynie wyrazy o określonym l. Problem opisany jest w pracy: R. Maj and St. Mrówczyński, *Inaccurate use of asymptotic formulas*, American Journal of Physics **72**, 922 (2004).

Teraz dokonujemy rozkładu na fale parcjalne asymptotycznej funkcji falowej $\varphi(r,\theta) = e^{ikz} + f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}$, gdzie pominęliśmy czynnik normalizacyjny. Falę padającą rozkładamy dzięki matematycznej tożsamości

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

Przybliżając funkcje Bessela dla $x >> l(l+1)$ jako $j_l(x) \approx \frac{1}{x}\sin\left(x - \frac{\pi l}{2}\right)$ i zauważając, że $i^l = \exp\left(i\frac{\pi l}{2}\right)$ dostajemy

$$\begin{aligned}\exp(ikz) &= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{kr}\exp\left(i\frac{\pi l}{2}\right)\sin\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right)P_l(\cos\theta) \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{2ikr}P_l(\cos\theta)\left(\exp(ikr) - \exp(-ikr + i\pi l)\right).\end{aligned}$$

Rozkładając amplitudę rozpraszania jako

$$f(\theta)=\sum_{l=0}^{\infty}\frac{A_l}{2ik}P_l(\cos\theta)$$

dostajemy

$$\begin{aligned}\varphi(r,\theta)&=e^{ikz}+f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}\\&=\sum_{l=0}^{\infty}\frac{1}{2ikr}P_l(\cos\theta)\left[(2l+1+A_l)\exp(ikr)-(2l+1)\exp(-ikr+i\pi l)\right]\end{aligned}\qquad(**)$$

Funkcję falową mamy więc zapisaną na dwa sposoby (*) i (**). Równość obu postaci dla wszystkich **r** wymaga, żeby były sobie równe współczynniki przy $P_l(\cos\theta)e^{ikr}$ i przy $P_l(\cos\theta)e^{-ikr}$. A zatem

$$\begin{cases}C_l\exp\left(-i\dfrac{\pi l}{2}+i\delta_l\right)=(2l+1)+A_l,\\ C_l\exp\left(i\dfrac{\pi l}{2}-i\delta_l\right)=(2l+1)\exp(i\pi l),\end{cases}$$

co daje

$$C_l=(2l+1)\exp\left(i\frac{\pi l}{2}+i\delta_l\right)\qquad\text{oraz}\qquad A_l=(2l+1)\left(\exp(i2\delta_l)-1\right).$$

Ostatecznie więc mamy

$$\boxed{f(\theta)=\sum_{l=0}^{\infty}\frac{(2l+1)}{2ik}\left(\exp(i2\delta_l)-1\right)P_l(\cos\theta)}$$

Widzimy, że przesunięcia fazowe są tak zdefiniowane, że gdy znikają $(\delta_l=0)$, amplituda rozpraszania jest zerowa $(f(\theta)=0)$. Metodę rozkładu na fale parcjalne stosuje się zwykle wtedy, gdy już kilka pierwszych wyrazów szeregu daje zadawalający wynik.

Różniczkowy przekrój czynny $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ dany jest wzorem

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=\left|f(\theta)\right|^2=\left|\sum_{l=0}^{\infty}\frac{(2l+1)}{2ik}\left(\exp(i2\delta_l)-1\right)P_l(\cos\theta)\right|^2.$$

Całkowity przekrój czynny σ obliczamy w następujący sposób

$$\sigma = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = 2\pi \int_{-1}^{1} d(\cos\theta) \left| f(\theta) \right|^2$$

$$= \frac{\pi}{2k^2} \int_{-1}^{1} d(\cos\theta) \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{l'=0}^{\infty} (2l+1)(2l'+1)\left(\exp(i2\delta_l)-1\right)\left(\exp(-i2\delta_{l'})-1\right) P_l(\cos\theta) P_{l'}(\cos\theta).$$

Korzystając z warunku ortogonalności wielomianów Legendre'a

$$\int_{-1}^{1} d(\cos\theta) P_l(\cos\theta) P_{l'}(\cos\theta) = \frac{2}{2l+1} \delta^{ll'} ,$$

znajdujemy

$$\sigma = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)\left(\exp(i2\delta_l)-1\right)\left(\exp(-i2\delta_l)-1\right) .$$

Ponieważ

$$\left(\exp(i2\delta_l)-1\right)\left(\exp(-i2\delta_l)-1\right) = \left(\exp(i\delta_l)-\exp(-i\delta_l)\right)\left(\exp(-i\delta_l)-\exp(i\delta_l)\right) = 4\sin^2 \delta_l ,$$

ostatecznie otrzymujemy

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

Twierdzenie optyczne

Ponieważ $P_l(\cos\theta = 1) = 1$, więc $f(\theta = 0) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{2ik} \left(\exp(i2\delta_l)-1\right)$.

Obliczmy urojoną część amplitudy „rozpraszania do przodu” ($\theta = 0$)

$$\Im f(\theta = 0) = \frac{f(\theta = 0) - f^*(\theta = 0)}{2i} = \frac{1}{2i} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{2ik} \left(\exp(i2\delta_l) + \exp(-i2\delta_l) - 2\right) .$$

Ponieważ $\exp(i2\delta_l) + \exp(-i2\delta_l) - 2 = \left(\exp(i\delta_l) + \exp(-i\delta_l)\right)^2 = -4\sin^2 \delta_l$, mamy

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

Twierdzenie optyczne, będące fundamentalnym wynikiem teorii rozpraszania, wiąże się w istocie z zasadą zachowania prawdopodobieństwa. Ugięcie o kąt zerowy odpowiada właściwie brakowi rozproszenia. Prawdopodobieństwo zaś braku rozproszenia określa prawdopodobieństwo rozproszenia na dowolny kąt, co wiąże się z całkowitym przekrojem czynnym.