

## 7 PORUCHOVÁ METÓDA PRE ROZPTYLOVÉ STAVY. ROZPTYL ČASTÍC NA STATICKOM SILOVOM POLI

### 7.1 ÚVOD

V tejto kapitole sa budeme venovať poruchovej metóde pre výpočet stacionárnych rozptylových stavov. Budeme sa zaoberať špeciálnym prípadom rozptylu častíc na statickom silovom poli opísanom potenciálnou energiou  $V(r)$ . S touto situáciou sa najčastejšie stretávajú v aplikáciách.

Náš postup bude takýto: najprv sa pozrieme bližšie na fyzikálnu formuláciu úlohy a sformulujeme príslušné okrajové podmienky pre riešenie bezčasovej Schrödingerovej rovnice. Skôr však, ako začneme s riešením, urobíme odbočku matematického charakteru. Oboznámime sa s Diracovou  $\delta$ -funkciou a zopakujeme si niekoľko poznatkov z teórie funkcií komplexnej premennej. Až potom prídeme k vlastnej poruchovej metóde pre výpočet rozptylových stavov, kde využijeme spomínané matematické poznatky.

### 7.2 FYZIKÁLNA FORMULÁCIA ROZPTYLOVÉHO PROBLÉMU

Typický prípad experimentu s rozptylom častíc možno opísať nasledujúcim spôsobom. Častice, ktoré hrajú úlohu rozptylových centier (pre určitosť si pod nimi môžeme predstaviť povedzme protóny) sa nachádzajú v terčíku, označenom ako  $T$  na obr. 7.1. Na terčík dopadá približne monoenergetický zväzok častíc typu  $B$  (povedzme elektróny), ktoré sa na terčíku rozptýlia, a po rozptyle sú zachytené detektormi  $R$  umiestnenými okolo terčíku. Pri experimente poznáme tieto údaje:

$j$  – hustotu prúdu dopadajúcich častíc

$N$  – počet častíc v terčíku

$dn$  – počet častíc zaregistrovaných určitým detektorom  $R$  za jednotku času

$d\Omega$  – priestorový uhol pokrytý týmto detektorom.

Počet častíc  $dn$  bude zrejme úmerný hustote prúdu dopadajúcich častíc, počtu častíc v terčíku a veľkosti priestorového uhla pokrytého daným detektorom, takže máme

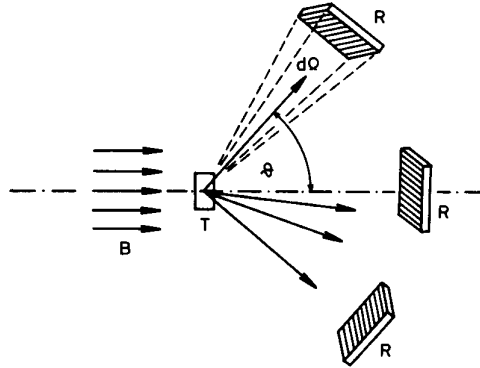
$$dn = \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right) jN d\Omega$$

Výraz v zátvorke je koeficient úmernosti označený tradičným spôsobom. Tento koeficient závisí od uhlov  $\vartheta$ ,  $\varphi$ . Rozmer  $d\sigma/d\Omega$  je  $m^2$  a preto ho nazývame

diferenciálnym účinným prierezom. O rozmere  $d\sigma/d\Omega$  sa presvedčíme rýchlo, ak si uvedomíme, že<sup>104</sup>

$$[dn] = s^{-1}, \quad [j] = m^{-2} s^{-1}, \quad [N] = 1, \quad [d\Omega] = 1$$

Vzťah (1) platí za predpokladu, že pri rozptyle ide vždy iba o interakciu jednej častice dopadajúceho zväzu s jednou časticou terča. V praktických prípadoch je tento predpoklad zväčša dobre splnený.



Obr. 7.1

Pri teoretickom opise sa preto zaujímame o rozptyl častíc zväzku na jedinej terčíkovej častici. Vzájomnú interakciu dopadajúcej a terčíkovej častice budeme opisovať potenciálnou energiou  $V(r)$  a pre jednoduchosť budeme predpokladať, že terčíková častica je oveľa ťažšia ako dopadajúca a počas interakcie ostáva fixovaná v začiatku súradnicovej sústavy.<sup>105</sup>

Pri adekvátnom kvantovomechanickom opise rozptylu častice na silovom centre by sme dopadajúcu časticu opisovali vlnovým balíkom a sledovali časový vývoj tohto balíka riešením časovej SchR. Pri takomto postupe sa však všetky formulky stávajú neprehľadnými. Ako sme už spomínali pri diskusii v článku 4.7, môžeme sa obmedziť na hľadanie vhodných riešení bezčasovej SchR. Takéto riešenia v prípade prechodu častice cez bariéru obsahovali (v oblasti mimo bariéry) vlnu dopadajúcu na bariéru z jednej strany, vlnu odrazenú od bariéry a vlnu, ktorá prešla bariérou.

V prípade rozptylu častice na silovom centre budeme hľadať také riešenia bezčasovej SchR, ktoré vo vzdialenosti ďaleko od rozptylového centra obsahujú

<sup>104</sup> Niekedy sa ako rozmer priestorového uhla  $d\Omega$  berie steradián a potom  $(d\sigma/d\Omega)$  má rozmer  $m^2 (\text{sterad})^{-1}$ .

<sup>105</sup> Tohto predpokladu sa môžeme zbaviť prechodom do súradnicovej sústavy, v ktorej je nehybné ťažisko dopadajúcej a terčíkovej častice. Po technickej stránke je to to isté, čo sme už urobili pri zavádzaní relatívnej súradnice v článku 4.12 a podrobnejšie sa k tomu ešte vrátíme v kapitole o rozptyle.

iba rovinnú vlnu priradenú dopadajúcej častici a rozbiehavú guľovú vlnu opisujúcu rozptýlenú časť dopadajúcej vlny.

Hamiltonov operátor pre časticu v poli silového centra s daným  $V(\mathbf{r})$  je

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r})$$

Bezčasovú SchR potom píšeme v tvare

$$\left[ H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (2)$$

a po zavedení  $U(\mathbf{r}) = (2m/\hbar^2)V(\mathbf{r})$ ,  $k^2 = (2m/\hbar)E$  upravíme (2) na tvar

$$(\Delta + \mathbf{k}^2)\psi(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) \quad (3)$$

Fyzikálny význam veličiny  $\mathbf{k}^2$  je jednoduchý. V rozptylovom experimente je totiž energia dopadajúcej častici rovná tej energii, ktorú jej udelilo urýchľujúce zariadenie (elektrónové delo, urýchľovač atď.). V oblasti ďaleko od terčika môžeme túto energiu písať ako  $E = \mathbf{p}^2/2m$  a pri zavedení vlnového vektora  $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$  ako  $E = \hbar^2\mathbf{k}^2/2m$ . Veličina  $\mathbf{k}$  v (3) je takto vlnovým vektorom dopadajúcej častici v oblasti mimo dosahu síl zodpovedným za interakciu.

Riešenie  $\psi(\mathbf{r})$  bezčasovej SchR, ktoré obsahuje dopadajúcu rovinnú vlnu  $\exp(ikz)$  a okrem nej pri veľkých hodnotách  $r$  iba rozptýlenú vlnu, spĺňa podmienku

$$\psi(\mathbf{r}) \rightarrow e^{ikz} + f(\vartheta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r} \quad r \rightarrow \infty \quad (4)$$

Toto tvrdenie vyplýva z nasledujúcej úvahy. Riešenie  $\psi(\mathbf{r})$  rovnice (2) je vlastnou funkciou operátora energie. Časová závislosť takéhoto riešenia je, tak ako pri všetkých stacionárnych stavoch,

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})e^{-i\omega t} \quad \omega = E/\hbar$$

Podľa (4) pre  $\Phi(\mathbf{r}, t)$  dostaneme

$$\Phi(\mathbf{r}, t) \rightarrow e^{i(kz - \omega t)} + \frac{f(\vartheta, \varphi)}{r} e^{i(kr - \omega t)} \quad r \rightarrow \infty \quad (5)$$

Prvý člen na pravej strane predstavuje dopadajúcu rovinnú vlnu, druhý sférickú rozbiehavú vlnu,  $f(\vartheta, \varphi)$  nazývame amplitúdou rozptylu.

Hustotu prúdu dopadajúcej vlny spočítame podľa známeho vzťahu

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2im} [\Phi^* \nabla \Phi - \Phi \nabla \Phi^*] \quad (6)$$

pričom za  $\Phi$  dosadíme iba člen  $\exp(ikz - \omega t)$  opisujúci dopadajúcu rovinnú vlnu. Ľahko sa presvedčíme o tom, že

$$j_z = j = \frac{\hbar k}{m}, \quad j_x = j_y = 0$$

Hustotu prúdu rozbiehavej sférickej vlny spočítame tak, že do (6) dosadíme za  $\Phi$  výraz  $r^{-1} f(\vartheta, \varphi) \exp(ikr - i\omega t)$ . Ak  $\nabla$  vyjadríme vo sférických súradniciach, dostaneme pre radiálnu zložku hustoty prúdu

$$j'_r = \frac{\hbar k}{m} \frac{1}{r^2} |f(\vartheta, \varphi)|^2 + \text{členy úmerné } r^{-3}$$

Počet častíc  $dn$  dopadajúcich za jednotku času do detektora pokrývajúceho priestorový uhol  $d\Omega$  je daný vzťahom

$$dn = j'_r r^2 d\Omega \quad (7)$$

kde  $dS = r^2 d\Omega$  je veľkosť plochy detektora kolmej na smer pohybu častíc rozptýlených daných smerom. Vzhľadom na to, že detektor je v skutočných experimentoch veľmi vzdialený od rozptylového centra ( $r/\lambda \gg 1$ , kde  $\lambda = 2\pi/k$ ,  $r/a_1 \gg 1$ , pričom  $a_1$  je Bohrov polomer) môžeme v (7) urobiť na pravej strane limitu  $r \rightarrow \infty$  a pre počet častíc registrovaných za jednotku času detektorom dostávame

$$dn = |f(\vartheta, \varphi)|^2 j d\Omega$$

Tento vzťah treba porovnať s (1) pri  $N = 1$  (lebo teraz sme uvažovali rozptyl na jednej častici).

Takto prichádzame k dôležitému výsledku

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\vartheta, \varphi)|^2 \quad (8)$$

Celkový účinným prierezom nazývame výraz

$$\sigma_0 = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \int |f(\vartheta, \varphi)|^2 d\Omega \quad (9)$$

To, čo sme doteraz povedali možno zhrnúť veľmi jednoducho:

– výsledky rozptylového experimentu sú charakterizované diferenciálnym účinným prierezom  $d\sigma/d\Omega$

– teoretické predpovede pre túto veličinu dostaneme tak, že nájdeme riešenie bezčasovej SchR (2) či (3) s asymptotikou (4) a  $d\sigma/d\Omega$  dostaneme potom pomocou (8).

Skôr ako začneme riešiť túto úlohu, musíme si v nasledujúcich článkoch uviesť niekoľko nevyhnutných poznatkov matematického charakteru. Nepôjde však iba o nejaké technické podrobnosti potrebné výlučne pre daný problém. Tento matematický aparát využijeme podstatne i neskôr pri ďalšom budovaní formalizmu kvantovej teórie.

### 7.3 DIRACOVA DELTA-FUNKCIA

Delta funkciu  $\delta(\mathbf{r})$  zaviedol Dirac v tridsiatych rokoch vo svojich prácach z kvantovej mechaniky a odvtedy sa vo fyzike bežne používa. Z matematického hľadiska však  $\delta$ -funkcie neboli dlho dobre definovanými objektami. Korektnú teóriu  $\delta$ -funkcií formuloval neskôr L. Schwartz v rámci teórie distribúcií. Tu si uvedieme len niekoľko základných myšlienok a tvrdení teórie distribúcií, podrobnejšiu teóriu a presné definície možno nájsť v literatúre.<sup>106</sup>

Začneme však s jednoduchými príkladmi, ktoré nám ukážu, čo to  $\delta$ -funkcia je a kedy sa s ňou vo fyzike stretávame.

Potenciálna energia rozloženia náboja s hustotou  $\rho(\mathbf{r})$  vo vonkajšom poli s potenciálom  $\varphi(\mathbf{r})$  je

$$U = \int \rho(\mathbf{r})\varphi(\mathbf{r})d^3r \quad (1)$$

Takisto je dobre známe, že potenciálna energia bodového náboja  $Q$  v bode  $\mathbf{r}_0$  je

$$U = Q\varphi(\mathbf{r}_0) \quad (2)$$

Obe formulky zrejme hovoria o tej istej veci a tak sa intuitívne zdá, že (2) je špeciálnym prípadom (1), lebo „bodový náboj“ intuitívne odpovedá náboju skoncentrovanému do veľmi malého objemu. Ak sa ale pokúsime sformulovať vec presnejšie, narazíme na ťažkosti. Stačí ak sa spýtame na to, aké rozloženie hustoty náboja  $\rho(\mathbf{r})$  môžeme priradiť bodovému náboju v bode  $\mathbf{r}_0$ . Odpoveď sa dá formulovať dvoma spôsobmi, označíme ich ako 1 a 2 a v druhom prípade uvedieme dva varianty.

<sup>106</sup> Schwartz, L.: Matematické metódy ve fyzice. Praha 1972. Gelfand, I. M. – Šilov, G. E.: Obobščennyye funkci i dejstvija nad nimi. Moskva 1959.

1. Predstavíme si bodový náboj  $Q$  ako limitu postupnosti priestorových rozložení náboja. Napríklad takúto

$$\rho_n(\mathbf{r}) = \begin{cases} 0 & \text{pre } |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0| > a_n = \frac{a}{n} \\ Q(4\pi a_n^3/3)^{-1} & \text{pre } |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0| < a_n \end{cases} \quad (3)$$

pričom  $a$  je istá veličina s rozmerom dĺžky. Fyzikálne je jasné, čo robíme. Konštruujeme postupnosť gúľ so stredom v bode  $\mathbf{r}_0$  a s polomerami  $a_n = a/n$ , ktoré postupne konvergujú k nule. Pre dané  $n$  volíme hustotu náboja vnútri gule tak veľkú, aby vždy platilo

$$\int \rho_n(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = Q \quad (4)$$

pričom hustota náboja mimo danej gule je nulová. Pre takúto postupnosť platí

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int \rho_n(\mathbf{r}) \varphi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = Q\varphi(\mathbf{r}_0) \quad (5)$$

čo by sme ľahko dokázali pomocou vety o strednej hodnote (predpokladáme pritom spojitost' potenciálu  $\varphi(\mathbf{r})$ ).

Bodovému náboju takto prisudzujeme postupnosť funkcií podľa schémy

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{bodový náboj} \\ Q \text{ v bode } \mathbf{r}_0 \end{array} \right\} \leftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} \text{postupnosť funkcií} \\ \rho_n(\mathbf{r}_0) \end{array} \right\} \quad (6)$$

Táto postupnosť má niektoré podivné vlastnosti. V každom bode  $\mathbf{r} \neq \mathbf{r}_0$  platí

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \rho_n(\mathbf{r}) = 0 \quad \mathbf{r} \neq \mathbf{r}_0 \quad (7)$$

ale v bode  $\mathbf{r}_0$  rastie  $\rho_n(\mathbf{r}_0)$  nad všetky hranice. Prítom ale pre každé  $n$  platí rovnica (4). Odtiaľ vidno, že limitu postupnosti  $\rho_n(\mathbf{r})$  treba zavádzať veľmi opatrne.

Podivné vlastnosti postupnosti  $\rho_n(\mathbf{r})$  nás veľmi neprekvapujú, pretože na otázku: aké rozloženie hustoty odpovedá bodovému náboju, sme inú odpoveď ani očakávať nemohli. Táto otázka ani nemá priamy fyzikálny zmysel, lebo hustotu bodového náboja merať nemôžeme. Fyzikálny zmysel má ale energia bodového náboja v poli vonkajšieho potenciálu  $\varphi(\mathbf{r})$  a tej podľa predchádzajúceho priradujeme dobre definovaný výraz stojaci na ľavej strane rovnice (5). Takto síce bodovému náboju priradujeme vzťahom (6) postupnosť funkcií  $\rho_n(\mathbf{r})$ , ale priradenie chápeme tak, že zmysel budú mať iba výrazy typu ľavej strany v (5).

Vo veľmi voľnom jazyku, ktorý fyzici najčastejšie používajú, hovoríme, že postupnosť  $\rho_n(\mathbf{r})$  konverguje k (trojrozsomernej)  $\delta$ -funkcii násobenej nábojom  $Q$

$$\rho_n(\mathbf{r}) \rightarrow Q\delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \quad (8)$$

a táto  $\delta$ -funkcia má nasledujúcu vlastnosť:

$$\int \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \varphi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = \varphi(\mathbf{r}_0) \quad (9)$$

pre ľubovoľnú spojitú funkciu  $\varphi(\mathbf{r})$ .

Pritom ale treba zdôrazniť, že táto obrazná terminológia znamená len to, čo už bolo povedané vyššie; teda to, že platí rovnica (5).

**2a.** V tomto prístupe si od začiatku uvedomíme, že nemá zmysel hovoriť podrobne o hustote bodového náboja, preto mu priradíme od začiatku iba symbol, ktorý bude vyzeráť formálne ako funkcia, ale nebude sa s ním dať robiť všetko to, čo bežne s funkciami robiť môžeme.

Jednotkovému bodovému náboju takto prisudzujeme symbol  $\delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ , ktorý má zmysel jedine vo výrazoch typu ľavej strany v (9) a tieto výrazy definujeme rovnicou (9).

**2b.** Tento postup je zovšeobecnením predchádzajúceho. Namiesto toho, aby sme zavádzali symboly pripomínajúce „výzorom“ funkciu, zavádzame rovno pojem funkcionálu. Pod funkcionálom rozumieme zobrazenie, ktoré každej funkcii z istej množiny priradí určité číslo. Bodový náboj  $Q$  umiestnený v bode  $\mathbf{r}_0$  by sme takto opísali funkcionálom, ktorý každému potenciálu  $\varphi(\mathbf{r})$  priradí číslo  $Q\varphi(\mathbf{r}_0)$ .

Tento postup je určite najvšeobecnejší a pomocou neho možno  $\delta$ -funkcie zaviesť konzistentným, elegantným a všeobecným spôsobom.

Ukazuje sa však, že oba spôsoby definície  $\delta$ -funkcie sú v istom zmysle ekvivalentné.

V ďalšom uvedieme niekoľko príkladov na postupnosti funkcií konvergujúcich k  $\delta$ -funkcii, ďalej uvedieme niekoľko dôležitých aplikácií, potom urobíme prehľad niektorých vlastností  $\delta$ -funkcie a napokon veľmi stručne spomenieme niektoré z myšlienok Schwartzovej teórie distribúcií.

Budeme hovoriť, že postupnosť funkcií  $\{f_n(x)\}$  konverguje k Diracovej  $\delta$ -funkcii ak platí

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} f_n(x) \varphi(x) dx \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) \varphi(x) dx = \varphi(0) \quad (10)$$

pre ľubovoľnú spojitú funkciu  $\varphi(x)$ , ktorá klesá rýchlo<sup>107</sup> k nule pre  $|x| \rightarrow \infty$ .

V rovniciach (10) treba stredný člen považovať iba za skrátenejší a zjednodušený zápis prvého člena. Dá sa ukázať (a intuitívne sa nám to vidí byť prijateľným, takže sa nebudeme pokúšať o dôkaz), že požiadavka (10) je ekvivalentná podmienkam

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} f_n(x) dx = 1 \quad (11a)$$

<sup>107</sup> Presnejšie pre každú funkciu  $\varphi(x)$  z množiny  $\mathcal{S}$  definovanej ďalej.

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_a^b f_n(x) dx = 0 \quad \text{ak} \quad 0 \notin (a, b) \quad (11b)$$

Uvedieme teraz niekoľko príkladov

*Príklad 1.* Nech

$$f_n(x) = \begin{cases} 0 & \text{pre } |x| > 1/(2n) \\ n & \text{pre } |x| \leq 1/(2n) \end{cases}$$

Podmienky (11a) a (11b) sú evidentne splnené.

*Príklad 2.* Nech

$$h_\varepsilon(x) = \frac{1}{\pi} \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2} \quad (12)$$

a uvažujeme limitu  $\varepsilon \rightarrow 0$ . O splnení (11a) sa ľahko presvedčíme a (11b) je splnené tiež, lebo  $h_\varepsilon(x)$  konverguje pre  $\varepsilon \rightarrow 0$  rovnomerne k nule v každom intervale  $\langle a, b \rangle$  neobsahujúcom začiatok.

*Príklad 3.* Postupnosť

$$g_a(x) = \frac{a}{\sqrt{\pi}} \exp(-a^2 x^2) \quad (13)$$

konverguje pre  $a \rightarrow \infty$  k  $\delta(x)$ . Pri dôkaze (11a) stačí využiť Laplaceov integrál

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-x^2) dx = \sqrt{\pi}$$

*Príklad 4.* Definujme funkciu  $f_n(x)$  vzťahom

$$f_n(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-n}^n e^{ikx} dx = \frac{1}{\pi x} \sin(nx) \quad (14)$$

Pre  $n \rightarrow \infty$  táto postupnosť konverguje k  $\delta(x)$ . Podmienka (11a) je ekvivalentná tvrdeniu

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin t}{\pi t} dt = 1$$

a tento výsledok je dobre známy, dokazuje sa pomocou teórie funkcií komplexnej premennej.<sup>108</sup>

<sup>108</sup> Pozri napr. Fuchs, B. A. – Sabat, B. V.: Funkcii kompleksnogo peremennogo. Moskva, 1959.



Podmienka (11 b) má v tomto prípade tvar

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_a^b \frac{1}{\pi x} \sin(nx) dx = 0 \quad \text{pre } 0 \notin \langle a, b \rangle \quad (15)$$

Toto tvrdenie je špeciálnym prípadom Riemannovej-Lebesgueovej vety z teórie funkcií reálnej premennej. Intuitívne ho možno vysvetliť tým, že s rastúcim  $n$  funkcia  $\sin(nx)$  osciluje čoraz rýchlejšie a kladné a záporné hodnoty podintegrálnej funkcie sa pri  $n \rightarrow \infty$  navzájom zrušia.

Teraz si podrobnejšie všimneme dve situácie, v ktorých sa často používajú delta funkcie.

Úplné systémy funkcií a  $\delta$ -funkcia

Nech  $\{\varphi_n(x)\}$ ,  $n = 1, 2, 3, \dots$  je úplný ortonormovaný systém funkcií na intervale  $(a, b)$ . Platí teda

$$\int_a^b \varphi_n^*(x) \varphi_k(x) dx = \delta_{nk}$$

a každú<sup>109</sup> funkciu  $f(x)$  možno zapísať v tvare

$$f(x) = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=1}^N c_n \varphi_n(x) \quad (16)$$

kde koeficienty  $c_n$  sú dané vzťahom

$$c_n = \int_a^b \varphi_n^*(y) f(y) dy \quad (17)$$

Ak dosadíme (17) do (16) dostaneme

$$f(x) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_a^b K_N(x, y) f(y) dy \quad (18)$$

kde

$$K_N(x, y) = \sum_{n=1}^N \varphi_n^*(x) \varphi_n(y) \quad (19)$$

Rovnice (18) a (19) ukazujú, že platí

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=1}^N \varphi_n^*(x) \varphi_n(y) = \delta(x - y) \quad (20)$$

<sup>109</sup> Túto „špecifikáciu“ by bolo treba pri podrobnejšej analýze upresniť, ale nebudeme sa tým zaoberať.

pričom symbol  $\delta(x - y)$  je definovaný vzťahom

$$f(x) = \int_a^b \delta(x - y) f(y) dy \quad (21)$$

Porovnanie (18) a (21) je dôvodom pre vzťah (20).

### **Fourierove integrály**

V článku 2.9 sme už videli, že súbor funkcií

$$\begin{aligned} \varphi_n(x) &= \frac{1}{\sqrt{L}} \exp(ik_n x) \\ k_n &= \frac{2\pi}{L} n, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \end{aligned} \quad (22)$$

tvorí úplný systém funkcií na úsečke  $(-L/2, L/2)$ . Interval medzi dvoma susednými povolenými hodnotami v  $k$ -priestore je  $(2\pi/L)$ .

Ak zväčšujeme dĺžku úsečky, interval medzi susednými hodnotami  $k$  klesá a prichádzame k domnienke (správnej), že úplný systém funkcií na nekonečnom intervale  $(-\infty, \infty)$  je tvorený všetkými funkciami typu  $\exp(ikx)$ , pričom  $k$  môže byť ľubovoľné reálne číslo.

Zovšeobecnením rozkladu

$$f(x) = \sum_n c_n \varphi_n(x)$$

platnom na intervale  $(-L/2, L/2)$  je potom Fourierov integrál

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c(k) e^{ikx} \frac{dk}{2\pi} \quad (23)$$

kde výraz  $2\pi$  je iba otázkou konvencie.

Našou úlohou je teraz nájsť koeficienty  $c(k)$  v rozklade (23). Za tým účelom násobíme obe strany rovnice funkciou  $\exp(-iqx)$  a integrujeme od  $-K$  po  $+K$ .

Dostaneme tak

$$\begin{aligned} \int_{-K}^K f(x) e^{-iqx} dx &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk c(k) \int_{-K}^K e^{i(k-q)x} dx = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dk c(k) \left\{ \frac{1}{\pi} \frac{\sin(k-q)K}{(k-q)} \right\} \end{aligned} \quad (24)$$

Podľa diskusie okolo rovnice (14) však výraz v zloženej zátvorke konverguje pre  $K \rightarrow \infty$  k  $\delta$ -funkcii  $\delta(k - q)$  a pravá strana v (24) potom bude

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk c(k) \delta(k - q) = c(q)$$

a toto je konečný výsledok. Koeficienty  $c(k)$  vystupujúce v (24) sú teda dané vzťahom

$$c(q) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iqx} f(x) dx \quad (25)$$

Predchádzajúci argument vlastne ukazuje, že systém funkcií

$$\psi_q(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{iqx}, \quad q \text{ reálne}$$

je úplný na intervale  $(-\infty, \infty)$  a ortonormovaný v zmysle

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_q^*(x) \psi_k(x) dx = \delta(q - k) \quad (26)$$

### *Niektoré vlastnosti $\delta$ -funkcií*

Ak chápeme  $\delta(x)$  ako limitu postupnosti

$$\delta(x) \leftrightarrow \{f_n(x)\} \quad (27)$$

v zmysle

$$\int \delta(x) \varphi(x) dx = \lim_{N \rightarrow \infty} \int f_N(x) \varphi(x) dx \quad (28)$$

potom môžeme zaviesť prirodzene aj ďalšie symboly obsahujúce  $\delta$ -funkciu, napríklad symbolu  $\delta'(x)$  priradíme postupnosť

$$\delta'(x) \equiv \frac{d\delta(x)}{dx} \leftrightarrow \{f'_n(x)\}$$

a definujeme

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta'(x) \varphi(x) dx = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} f'_N(x) \varphi(x) dx \quad (29)$$

Integrál na pravej strane upravíme integráciou po častiach; využijeme to, že  $f_N(x)$  i  $\varphi(x)$  idú rýchlo k nule pre  $|x| \rightarrow \infty$  a dostaneme

$$\int_{-\infty}^{\infty} f'_N(x) \varphi(x) dx = [f_N(x) \varphi(x)]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} f_N(x) \varphi'(x) dx$$

a po dosadení na pravú stranu (29) máme

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta'(x) \varphi(x) dx = -\varphi'(0)$$

Podobným postupom sa môžeme presvedčiť o tom, že  $\delta$ -funkcia má nasledujúce vlastnosti

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) f(x) dx = f(0) \quad (30a)$$

$$\delta(-x) = \delta(x) \quad (30b)$$

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x), \quad a \neq 0 \quad (30c)$$

$$\delta(x^2 - a^2) = \frac{1}{2|a|} \{ \delta(x - a) + \delta(x + a) \} \quad (30d)$$

Nech  $h(x)$  je rastúcou funkciou  $x$  a nech  $h(x_0) = 0$ , potom

$$\delta(h(x)) = \frac{1}{h'(x_0)} \delta(x - x_0) \quad (30e)$$

ďalej platí

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - a) \delta(x - b) dx = \delta(a - b) \quad (30f)$$

Napokon si všimneme podrobnejšie Schwartzovo zavedenie distribúcií, kvôli jednoduchosti len v jednorozmernom prípade.<sup>110</sup>

Nech  $\mathcal{M}$  je množina funkcií. Ak ku každej funkcii  $f \in \mathcal{M}$  priradíme číslo, označené ako  $T[f]$  hovoríme, že na množine  $\mathcal{M}$  je definovaný funkcionál  $T$ .

Ak z  $f_1 \in \mathcal{M}, f_2 \in \mathcal{M}$  vyplýva  $c_1 f_1 + c_2 f_2 \in \mathcal{M}$  pre všetky čísla  $c_1, c_2$  hovoríme, že  $\mathcal{M}$  je lineárny priestor. Funkcionál  $T$  definovaný na lineárnom priestore sa nazýva lineárny, ak platí  $T[c_1 f_1 + c_2 f_2] = c_1 T[f_1] + c_2 T[f_2]$  pre všetky  $f_1, f_2 \in \mathcal{M}$  a všetky čísla  $c_1, c_2$ .

Nech  $f(x)$  je definovaná na intervale  $(-\infty, +\infty)$ . Množinu všetkých bodov, kde  $f(x) \neq 0$  (presnejšie uzáver tejto množiny) nazývame nositeľom funkcie  $f$ .

Ak funkcia  $f(x)$ , definovaná na celej reálnej osi je nekonečne mnohokrát diferencovateľná a má konečný nositeľ, hovoríme, že  $f(x)$  patrí do množiny  $\mathcal{D}$ .

Napríklad funkcia

$$\varphi(x) = \begin{cases} 0, & \text{pre } |x| \geq a > 0 \\ \exp\left(-\frac{1}{a^2 - x^2}\right), & \text{pre } |x| < a \end{cases}$$

<sup>110</sup> Zvyšok článku možno pri prvom čítaní vynechať.

patrí do množiny  $\mathcal{S}$ . Definícia množiny  $\mathcal{S}$  aj príklad pochádzajú od L. Schwartza. Množina  $\mathcal{S}$  nie je taká chudobná, ako by sa mohlo zdať. Napríklad ku každej spojitej funkcii  $f(x)$  s ohraničeným nositeľom a pre ľubovoľné  $\varepsilon > 0$  možno nájsť funkciu  $g_\varepsilon \in \mathcal{S}$  takú, že  $|f(x) - g_\varepsilon(x)| < \varepsilon$  pre všetky  $x$ .

Konvergencia na množine  $\mathcal{S}$  je zavedená nasledovne. Hovoríme, že postupnosť funkcií  $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n, \dots$ , z ktorých každá patrí do  $\mathcal{S}$ , konverguje k funkcii  $\varphi \in \mathcal{S}$ , ( $\varphi_n \rightarrow \varphi$ ), ak nositele všetkých funkcií  $\varphi_j$  ležia v istom intervale  $\langle -k, k \rangle$ , a ak  $\varphi_n^{(l)}$  konverguje na tomto intervale pre  $n \rightarrow \infty$  rovnomerne k  $\varphi^{(l)}$  pre ľubovoľné pevné  $l$ . Symbol  $\varphi^{(l)}$  označuje  $l$ -tú deriváciu  $\varphi$ , pričom  $\varphi^{(0)} \equiv \varphi$ .

**Definícia:** Funkcionál  $T[\varphi]$  je spojitý na množine  $\mathcal{S}$ , ak z  $\varphi_n \rightarrow \varphi$  vyplýva  $T[\varphi_n] \rightarrow T[\varphi]$ .

Schwartzova definícia distribúcie je nasledovná:

Distribúciu nazývame každý lineárny spojitý funkcionál na množine  $\mathcal{S}$ .

Ako príklad uvidíme Diracovu  $\delta$ -funkciu, ktorá sa teraz objaví ako funkcionál, ktorý každej funkcii  $\varphi \in \mathcal{S}$  priradí jej hodnotu v bode  $x = 0$

$$T_\delta[\varphi] = \varphi(0)$$

Ľahko sa môžeme presvedčiť o tom, že tento funkcionál je lineárny a spojitý, čiže je distribúciou.

Ďalší príklad možno konštruovať takto. Nech  $f(x)$  je funkcia definovaná na intervale  $(-\infty, +\infty)$  a nech  $f(x)$  je integrovateľná na každom konečnom intervale. Možno dokázať, že

$$T_f(\varphi) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\varphi(x) dx \quad (31)$$

je lineárnym spojitým funkcionálom, čiže tiež je distribúciou.

Distribúcie, ktoré možno zapísať v tvare (31) sa nazývajú regulárnymi, všetky ostatné singulárnymi. Výraz (31) má bežný tvar skalárneho súčinu,<sup>111</sup> namiesto označenia  $T_f[\varphi]$  sa preto často používa

$$T_f[\varphi] = (f|\varphi)$$

V priestore distribúcií sa konvergencia definuje nasledovne. Ak pre každú funkciu  $\varphi \in \mathcal{S}$  platí  $T_n[\varphi] \rightarrow T[\varphi]$ , tak hovoríme, že postupnosť distribúcií  $T_n$  konverguje k distribúcii  $T$ .

---

<sup>111</sup> V tomto článku uvažujeme len reálne funkcie.

Ukazuje sa, že každú distribúciu možno vyjadriť ako limitu postupnosti regulárnych distribúcií.<sup>112</sup> Ku každej distribúcii  $T$  možno nájsť postupnosť funkcií  $f_n$  tak, že pre každé  $\varphi$  platí

$$T[\varphi] = \lim_{n \rightarrow \infty} (f_n | \varphi) \quad (32)$$

Toto tvrdenie je vlastne návodom na to, ako sa priradenie  $\delta$ -funkcie istej postupnosti dá urobiť matematicky korektným spôsobom.

## 7.4 INTEGROVANIE V KOMPLEXNEJ ROVINE

V aplikáciách sa často používa niekoľko trikov s integrovaním v komplexnej rovine. V tomto článku si ich veľmi stručne pripomenieme.

Komplexnú funkciu  $f(z) = u(z) + iv(z)$ , kde  $u, v$  sú reálne funkcie komplexnej premennej  $z = x + iy$  nazývame holomorfnou v oblasti  $\mathcal{D}$ , ak v každom bode tejto oblasti existuje derivácia  $f'(z)$  definovaná ako limita  $\Delta f / \Delta z$  pre  $\Delta z \rightarrow 0$ . Derivácia  $f'(z)$  nezávisí od smeru  $\Delta z$  a odtiaľ (ak raz vyberieme  $\Delta z = \Delta x$  a raz  $\Delta z = i\Delta y$ ) dostávame

$$\frac{\Delta u + i\Delta v}{\Delta x} = \frac{\Delta u + i\Delta v}{i\Delta y}$$

a po limite máme Cauchyho-Riemannove podmienky

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial y} \quad (1a)$$

$$\frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial v}{\partial x} \quad (1b)$$

Základná vlastnosť holomorfnjej funkcie je obsiahnutá v Cauchyho vete, ktorá tvrdí, že integrál z holomorfnjej funkcie  $f(z)$  po uzavretej krivke  $C$ , ktorá aj so svojím vnútorným leží v oblasti holomorfnosti funkcie  $f$ , je rovný nule.

$$\oint_C f(z) dz = 0 \quad (2)$$

Toto tvrdenie je ekvivalentné podmienkam (1). Skutočne, ak prepíšeme (2) po dosadení  $f = u + iv$ ,  $dz = dx + i dy$  dostaneme pre reálnu a imaginárnu časť (2)

---

<sup>112</sup> Pozri napr. 2. diel monografie Gel'fanda a Šilova, už citovanej v tomto článku.

$$\oint_c \{u(x, y)dx - v(x, y)dy\} = 0 \quad (3a)$$

$$\oint_c \{v(x, y)dx - u(x, y)dy\} = 0 \quad (3b)$$

Prepíšme prvú rovnicu v označení bežnom pre fyzikov tak, že položíme  $A_x(x, y) = u(x, y)$ ,  $A_y(x, y) = -v(x, y)$ . Máme potom

$$\oint_c (A_x dx + A_y dy) = \oint_c \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} = \oint_c (\nabla \times \mathbf{A})_z \cdot d\mathbf{S} \quad (4)$$

pričom sme využili Stokesovu vetu pre funkcie reálnej premennej. Pre  $(\nabla \times \mathbf{A})_z$  máme hneď

$$(\nabla \times \mathbf{A})_z = \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} = -\frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y}$$

a to sa rovná nule podľa podmienky (1b).

Cauchyho veta (2) vedie priamo k často používanej vete o počítaní integrálov pomocou rezíduí. Uvažujme najprv holomorfnú funkciu  $f(z)$  a integrál

$$\oint_c \frac{f(z)}{z} dz$$

kde  $c$  je kružnica s malíčkým polomerom a so stredom v začiatku. Na tejto kružnici  $z = re^{i\varphi}$ . Integrál rýchlo vyčíslime a dostaneme

$$\oint_c \frac{f(z)}{z} dz = 2\pi i f(0)$$

Jednoduchým zovšeobecnením tohto výsledku dostaneme: Ak  $f(z)$  je holomorfná v oblasti  $D$ ,  $C$  je jednoduchá uzavretá krivka v tejto oblasti a bod  $a$  leží vnútri nej, potom

$$\oint_c \frac{f(z)}{z-a} dz = 2\pi i f(a) \quad (5)$$

Namiesto pokusu o dôkaz uveďme len to, že integrál po celej krivke na obr. 7.2 je nulový, lebo vnútri nej je funkcia  $f(z)/(z-a)$  holomorfná. Preto pôvodný integrál cez krivku  $C$  sa rovná integrálu cez krivku  $C'$ , a vtedy môžeme použiť predchádzajúci argument.

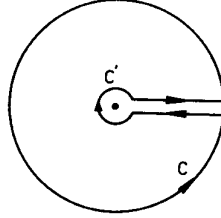
Ak funkcia  $g(z)$  je holomorfná v danej oblasti až na niekoľko bodov  $a_1, a_2, \dots, a_N$  v okolí ktorých platí

$$g(z) \approx \frac{R_i}{z-a_i} \quad \text{v okolí } a_i$$

potom zovšeobecnením predchádzajúceho argumentu dostaneme

$$\oint_c g(z) dz = 2\pi i \sum R_i$$

a to je tvrdenie, ktoré sa najčastejšie používa v aplikáciách.



Obr. 7.2

## 7.5 GREENOVA FUNKCIA OPERÁTORA $\nabla^2 + q^2$

Pri riešení mnohých problémov súvisiacich s diferenciálnymi rovnicami je často výhodné použiť formalizmus Greenových funkcií. Tento formalizmus nám umožní veľmi jednoducho vyjadriť poruchový rozvoj riešenia problému rozptylu.

Mnohé fyzikálne problémy vedú ku Greenovým funkciám veľmi prirodzene. Matematický opis príslušnej fyzikálnej situácie má často schematický tvar

$$D\Phi = J$$

kde  $D$  je diferenciálny operátor, veličina  $F$  charakterizuje odozvu uvažovaného systému na vonkajší podnet, vyjadrený pravou stranou  $J$ . Greenovu funkciu dostaneme potom v špeciálnom prípade ako odozvu sústavy na „bodový“ vonkajší podnet  $J$ . Nebudeme sa tu snažiť rozvíjať teóriu v takomto všeobecnom tvare, namiesto toho si uvedieme jednoduchý konkrétny príklad.

Prípomeňme si však najprv niektoré poznatky z elektrostatiky. Potenciál  $\varphi(\mathbf{r})$  budený bodovým nábojom  $Q$  umiestneným v bode  $\mathbf{r}'$  je daný vzťahom

$$\varphi(\mathbf{r}) = \frac{Q}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (1)$$

Potenciál spojitého rozloženia náboja s hustotou  $\rho(\mathbf{r}')$  je potom

$$\varphi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(\mathbf{r}') d^3r'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (2)$$



a tento potenciál spĺňa Laplaceovu rovnicu

$$\Delta\varphi(\mathbf{r}) = -\frac{1}{\varepsilon_0}\rho(\mathbf{r}) \quad (3)$$

ktorú dostaneme hneď zo vzťahov  $\nabla \cdot \mathbf{E} = \rho/\varepsilon_0$ ,  $\mathbf{E} = -\nabla\varphi$ .

Ak bodovému náboju  $Q$  v bode  $\mathbf{r}'$  priradíme hustotu opísanú výrazom  $Q\delta^{(3)}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ , potom pre bodový náboj máme z (3) rovnicu

$$\Delta\varphi(\mathbf{r}) = -\frac{Q}{\varepsilon_0}\delta^{(3)}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \quad (4)$$

a porovnaním s (1) vidíme, že musí platiť<sup>113</sup>

$$\Delta\left\{-\frac{1}{4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\right\} = \delta^{(3)}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$$

kde  $\Delta$  pôsobí iba na premennú  $\mathbf{r}$ . Rovnicu (5) by sme teraz mali poctivo dokázať, ale nebudeme to robiť, lebo ju dostaneme ako špeciálny prípad niečoho, čo dokážeme neskôr – zatiaľ budeme predpokladať, že (5) skutočne platí. Ak označíme

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \quad (6)$$

prepíšeme (5) do tvaru

$$\Delta G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta^{(3)}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \quad (7)$$

a máme matematické vyjadrenie tvrdenia: Greenova funkcia  $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  je reakciou na bodový podnet. Riešenie (2) rovnice (3) potom píšeme ako

$$\varphi(\mathbf{r}) = \int G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\left(-\frac{1}{\varepsilon_0}\rho(\mathbf{r}')\right)d^3\mathbf{r}' \quad (8)$$

teda ako súčet reakcií na jednotlivé bodové podnety.

V ďalšom sa budeme zaujímať o riešenie rovnice

$$(\nabla^2 + q^2)\psi(\mathbf{r}) = \chi(\mathbf{r}) \quad (9)$$

<sup>113</sup> Je zrejme, že všetky vzťahy tohto typu treba chápať v zmysle distribúcií, t. j. zjednodušene povedané význam majú iba tvrdenia typu

$$\int \Delta\left(\frac{1}{4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\right)f(\mathbf{r}')d^3\mathbf{r}' = \int \delta^{(3)}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')f(\mathbf{r}')d^3\mathbf{r}'$$

kde  $f(\mathbf{r}')$  je ľubovoľná „dostatočne slušná“ funkcia.

ktorá sa od Laplaceovej líši iba prítomnosťou  $q^2$  na ľavej strane. Pri riešení budeme postupovať tak, ako v predchádzajúcom prípade – najprv nájdeme  $\psi(\mathbf{r})$  buď bodovým podnetom, potom ukážeme, že pri nebodovom  $\chi(\mathbf{r})$  môžeme dostať riešenie  $\psi(\mathbf{r})$  ako súčet riešení pri bodových podnetoch a nakoniec dopočítame niektoré veci, ktoré si cestou odložíme na neskôr.

Označme teda symbolom  $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  riešenie rovnice s bodovým zdrojom

$$(\nabla^2 + q^2)G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (10)$$

Poznamenajme hneď, že riešenie  $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  nie je takto špecifikované (bez určenia okrajových podmienok) jednoznačne. Riešením rovnice (10) je i funkcia

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \psi_0(\mathbf{r})$$

kde  $\psi_0(\mathbf{r})$  je ľubovoľné riešenie homogénnej rovnice

$$(\nabla^2 + q^2)\psi_0(\mathbf{r}) = 0 \quad (11)$$

V ďalšom budeme mať na mysli jedno ľubovoľné (ale fixované) riešenie rovnice (10). Jeho explicitný tvar uvedieme neskôr.

Ukážeme si teraz, že ľubovoľné riešenie rovnice (9) môžeme zapísať v tvare

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_0(\mathbf{r}) + \int G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\chi(\mathbf{r}')d^3\mathbf{r}' \quad (12)$$

kde  $\psi_0(\mathbf{r})$  má opäť predchádzajúci význam.

Skutočne, ak pôsobíme operátorom  $(\nabla^2 + q^2)$  na pravú stranu v (12), dostaneme pri pôsobení na  $\psi_0(\mathbf{r})$  nulu a pôsobením na druhý člen dostaneme

$$\int \{(\nabla^2 + q^2)G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\}\chi(\mathbf{r}')d^3\mathbf{r}' = \int \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\chi(\mathbf{r}')d^3\mathbf{r}' = \chi(\mathbf{r})$$

Vidíme, že funkcia  $\psi(\mathbf{r})$  v tvare (12) je naozaj riešením rovnice (9). Pre lineárne rovnice platí vo všeobecnosti, že dve rôzne riešenia nehomogénnej rovnice sa môžu líšiť najviac o riešenie príslušnej homogénnej rovnice, preto vo vzťahu (12) sú už zahrnuté všetky riešenia rovnice (9) – navzájom sa líšiacie voľbou  $\psi_0(\mathbf{r})$ . To, aké  $\psi_0$  treba zvoliť, je v konkrétnom prípade špecifikované napríklad okrajovými podmienkami.<sup>114</sup> Ostáva nám už len nájsť explicitný tvar riešenia rovnice (10). Urobíme to dvoma spôsobmi. Prvý je jednoduchý a predpokladá platnosť rovnice (5) známej z elektrostatiky. Druhý je zložitejší, ale úplnejší.

Ideme teda najprv dokázať, že

$$G_+(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{iq|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \quad (13)$$

<sup>114</sup> V predchádzajúcom príklade z elektrostatiky je riešenie špecifikované požiadavkou, aby potenciál v neprítomnosti nábojov bol nulový, alebo okrajovou podmienkou  $\varphi(\mathbf{r}) \rightarrow 0$  pre  $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$ .

je riešením rovnice (10). Pre jednoduchosť položíme  $\mathbf{r}' = 0$  a budeme dokazovať

$$(\nabla^2 + q^2) \left\{ -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{iqr}}{r} \right\} = \delta^{(3)}(\mathbf{r}) \quad (14)$$

Po rozpísaní

$$\nabla^2 \left( \frac{1}{r} e^{iqr} \right) = e^{iqr} \nabla^2 \frac{1}{r} + 2(\nabla e^{iqr}) \cdot \left( \nabla \frac{1}{r} \right) + \frac{1}{r} \nabla^2 e^{iqr} \quad (15)$$

a pre jednotlivé členy máme

$$\begin{aligned} \nabla^2 \frac{1}{r} &= -4\pi \delta^{(3)}(\mathbf{r}), & \nabla e^{iqr} &= iq \frac{\mathbf{r}}{r} e^{iqr} \\ \nabla \frac{1}{r} &= -\frac{\mathbf{r}}{r^3}, & \nabla^2 e^{iqr} &= \left( \frac{2iq}{r} - q^2 \right) e^{iqr} \end{aligned} \quad (16)$$

pričom ostatný z nich dostaneme tak, že  $\nabla^2 = \Delta$  zapíšeme vo sférických súradniciach a využijeme to, že funkcia, ktorú derivujeme, nezávisí od  $\vartheta$ ,  $\varphi$ . Po dosadení (16) do (15) a využití  $\exp(iqr)\delta^{(3)}(\mathbf{r}) = \delta^{(3)}(\mathbf{r})$  sa presvedčíme o správnosti (14). Poznamenajme ešte, že na rovnici (10) sa nič nezmení, ak urobíme zámenu  $q \rightarrow -q$ .

Odtiaľ vidno, že spolu s (13) bude riešením rovnice (10) aj funkcia

$$G_-(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{-iq|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \quad (17)$$

O fyzikálnych rozdieloch medzi riešeniami (13) a (17) budeme hovoriť v nasledujúcom článku.<sup>115</sup>

Napokon nájdeme ešte Greenove funkcie  $G_+$ ,  $G_-$  priamo ako riešenie diferenciálnej rovnice (10). Budeme pritom používať techniku Fourierových integrálov spomínanú v článku 2 a integrovanie v komplexnej rovine diskutované v článku 3. Použitím (3.14) zapíšeme  $\delta$ -funkciu na pravej strane (10) ako

$$\begin{aligned} \delta^{(3)}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') &= \delta(x-x')\delta(y-y')\delta(z-z') = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3\mathbf{k} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \end{aligned} \quad (18)$$

a funkciu  $G(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$  zapíšeme ako

$$G(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int g(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} d^3\mathbf{k} \quad (19)$$

<sup>115</sup> Funkcie  $G_+$  a  $G_-$  predstavujú dva možné (z hľadiska praktických aplikácií užitočné) spôsoby špecifikácie Greenovej funkcie. Ďalšie možné tvary možno dostať pridaním ľubovoľného riešenia homogénnej rovnice.

Ak dosadíme (19) a (18) do (10) a využijeme  $\nabla^2 \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) = -k^2 \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$  dostaneme porovnaním oboch strán

$$g(\mathbf{k}) \cdot (k^2 - q^2) = -1$$

$$g(\mathbf{k}) = -\frac{1}{k^2 + q^2}, \quad \text{pre } k^2 \neq q^2$$

a po dosadení do (19) máme (formálne)

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = -\frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{1}{k^2 - q^2} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} d^3 \mathbf{k} \quad (20)$$

Pri integrovaní by sme narazili na ťažkosti pri  $k^2 = q^2$ . Toto ani nie je prekvapujúce, lebo k riešeniu rovnice (10) možno pridať riešenie príslušnej homogénnej rovnice a v parametrizácii (19) to odpovedá práve členom, v ktorých  $k^2 = q^2$ , takže funkcia  $g(\mathbf{k})$  nebude určená pre tie  $\mathbf{k}$ , pre ktoré platí  $k^2 = q^2$ . Určenie dôsledkov tejto nejednoznačnosti si necháme až nakoniec, zatiaľ ťažkosť, na ktorú sme narazili obídeme trikom.

Budeme zatiaľ číslo  $q$  považovať za komplexné s malou imaginárnou časťou, potom pri integrácii v (20) už nenarazíme na pól, ktorý teraz leží mimo reálnej osi.

Označme v (20)  $\boldsymbol{\rho} = (\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ , vyberme os  $z$  v  $\mathbf{k}$ -priestore v smere  $\boldsymbol{\rho}$  a prejdime v  $\mathbf{k}$ -priestore k sférickým súradniciam. Integrál cez uhol  $\vartheta$  je triviálny, lebo integrand od neho nezávisí, integrál cez  $\vartheta$  vypočítame s použitím

$$\int_0^\pi e^{ik\rho \cos \vartheta} \sin \vartheta d\vartheta = \frac{1}{ik\rho} [e^{ik\rho} - e^{-ik\rho}]$$

a máme

$$G(\boldsymbol{\rho}) = -\frac{1}{(2\pi)^2} \frac{1}{\rho i} \int_0^\infty k^2 dk \frac{1}{k} [e^{ik\rho} - e^{-ik\rho}] \frac{1}{k^2 - q^2}$$

Integrál rozdelíme na dva a v druhom z nich zameníme premenné  $k \rightarrow -k$ . Dostaneme tak

$$G(\boldsymbol{\rho}) = -\frac{1}{i\rho(2\pi)^2} \int_{-\infty}^\infty k \frac{e^{ik\rho}}{k^2 - q^2} dk$$

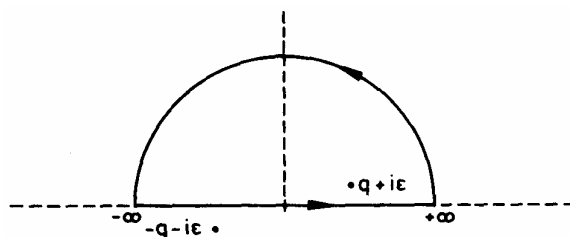
Zatiaľ je  $q$  stále komplexné. Zavedieme teraz dve Greenove funkcie tak, že v prvom prípade položíme  $q = q + i\varepsilon$ , kde  $q$  na pravej strane už chápeme ako reálne číslo a  $\varepsilon > 0$ ; v druhom prípade položíme  $q = q - i\varepsilon$  a napokon urobíme limitu  $\varepsilon \rightarrow 0$ . Prvú z týchto funkcií označíme  $G_+(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ , druhú  $G_-(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ .

Dostaneme

$$G(\boldsymbol{\rho}) = -\frac{1}{4\pi^2 i\rho} \int_{-\infty}^\infty k \frac{e^{ik\rho}}{(q + i\varepsilon - k)(q + i\varepsilon + k)} dk \quad (21)$$

Integrál na pravej strane vypočítanie pomocou vety o rezíduách z teórie funkcií komplexnej premennej. Pravda, v integráli (21) nemáme integráciu po uzavretej krivke, iba po reálnej osi. Možno si však predstaviť, že ide o reálnu os v komplexnej rovine premennej  $k$ . Stačí si potom uviesť, že v hornej polovine je  $\text{Im}k > 0$  a teda  $\exp(i\text{Im}k \cdot \rho) = \exp(-\rho \cdot \text{Im}k)$  a to pre  $\rho > 0$  je rýchlo klesajúca funkcia  $\text{Im}k$ . Ak teda doplníme integračnú dráhu o polkružnicu s veľkým polomerom (v limite s nekonečným polomerom) v hornej polovine komplexnej premennej  $k$  (obr. 7.3), dostaneme uzavretú krivku. Integrál po polkružnici je však v limite nulový, preto integrál po celej krivke je rovný integrálu po reálnej osi, ktorý chceme spočítať. Vnútri integračnej krivky leží jeden pól integrandu, a to v bode  $k = q + i\varepsilon$ . Pomocou vety o rezíduu ľahko dostaneme (už po limite  $\varepsilon \rightarrow 0$ , ktorú urobíme až nakoniec):

$$G_+(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{iq\rho}}{\rho}, \quad \rho = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \quad (22)$$



Obr. 7.3

Tým istým spôsobom vypočítame Greenovu funkciu  $G_-(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  a prichádzame k výsledku

$$G_-(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{-iq\rho}}{\rho}, \quad \rho = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \quad (23)$$

Fyzikálny rozdiel medzi  $G_+$  a  $G_-$  vidno priamo zo vzťahov (22) a (23). Funkcia  $G_+$  má tvar rozbiehavých guľových vln šíriacich sa z miesta „bodového podnetu“ a funkcia  $G_-$  zodpovedá zbiehavým vlnám šíriacim sa smerom do centra.

Vráťme sa teraz k nejednoznačnosti, na ktorú sme narazili pri riešení rovnice

$$g(\mathbf{k}) \cdot (k^2 - q^2) = -1 \quad (24)$$

Pre  $k^2 = q^2$  sa nedá nájsť funkcia (v obvyklom zmysle)  $g(\mathbf{k})$  tak, aby vzťah (24) bol splnený. V skutočnosti však stačí žiadať, aby vzťah (24) bol splnený iba v zmysle

distribúcií. Potom však distribúcia  $g(\mathbf{k})$  nie je vzťahom (24) definovaná jednoznačne. Ak si uvedomíme, že

$$(k^2 - q^2) \cdot \delta(k^2 - q^2) = 0$$

zistíme, že ak určitá distribúcia  $g(\mathbf{k})$  spĺňa vzťah (24), potom ho spĺňa i distribúcia

$$g(\mathbf{k}) + f(\mathbf{k}) \cdot \delta(k^2 - q^2) \quad (25)$$

kde  $f(\mathbf{k})$  je ľubovoľná „slušná“ funkcia. Ľahko sa dá presvedčiť o tom, že táto nejednoznačnosť je presne tá, ktorú sme čakali: ku Greenovej funkcii možno vždy pridať riešenie homogénnej rovnice. Po troche námahy s integrálmi v komplexnej premennej je možné presvedčiť sa o tom, že dva rôzne spôsoby špecifikácie distribúcie  $g(\mathbf{k})$  vedúce k funkciám  $G_+$  a  $G_-$  sa presne odlišujú spôsobom ukázaným vo vzťahu (25).

Zhrňme teda na záver: Nejednoznačnosti v určení Greenovej funkcie vzťahom (10) vedú k nutnosti špecifikovať ju iným vhodným spôsobom. Nie je to však na závalu, pretože vo vzťahu (12), ktorý ukazuje praktické použitie Greenovej funkcie, aj tak vystupuje nejednoznačnosť rovnakého typu daná členom  $\psi_0(\mathbf{r})$ , ktorý treba nájsť z podmienok (napr. okrajových) kladených na riešenie  $\psi(\mathbf{r})$ . V praxi je potom výhodné špecifikovať Greenovu funkciu podľa okrajových podmienok úlohy tak, aby nájdenie  $\psi_0(\mathbf{r})$  bolo jednoduché, prípadne aby stačilo  $\psi_0(\mathbf{r}) = 0$ .

## 7.6 BORNOVO PŘIBLIŽENIE PRE ROZPTYL ČASTICE NA POTENCIÁLI

Po troch prevažne technických článkoch sa zas vrátíme naspäť k fyzike. Budeme sa zaujímať o približný výpočet amplitúdy rozptylu a diferenciálneho účinného prierezu pre rozptyl častice na statickom potenciáli  $V(\mathbf{r})$ .

Podľa článku 7.2 amplitúdu rozptylu častice s energiou  $E = \hbar^2 q^2 / 2m$  na potenciáli  $V(\mathbf{r})$  dostaneme z toho riešenia rovnice

$$(\nabla^2 + q^2) \psi(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \quad (1)$$

$$U(\mathbf{r}) = \frac{2m}{\hbar} V(\mathbf{r})$$

ktoré má asymptotický tvar

$$\psi(\mathbf{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{iqz} + f(\vartheta, \varphi) \frac{e^{iqr}}{r} \quad (2)$$

Takéto riešenie v približnom tvare ľahko dostaneme pomocou Greenovej funkcie

$$G_+(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} e^{iq|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (3)$$

ktorá spĺňa rovnicu

$$(\nabla^2 + q^2)G_+(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (4)$$

Najprv ukážeme, že diferenciálna rovnica (1) spolu s okrajovou podmienkou (2) sú ekvivalentné jedinej integrálnej rovnici

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{iqz} + \int G_+(\mathbf{r}, \mathbf{r}')U(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}')d^3r' \quad (5)$$

Skutočne, ak na obe strany pôsobíme operátorom  $(\nabla^2 + q^2)$  na ľavej strane dostaneme ľavú stranu rovnice (1), z pravého člena na pravej strane (5) máme nulu, lebo  $(\nabla^2 + q^2) \exp(iqz) = 0$  a z posledného člena v (5) máme

$$(\nabla^2 + q^2)G_+(\mathbf{r}, \mathbf{r}')U(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}')d^3r' = \int \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')U(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}')d^3r'$$

a s využitím základnej vlastnosti  $\delta$ -funkcie máme pravú stranu v (1). Asymptotická podmienka je tiež splnená. Pre  $r \gg r'$  totiž možno písať

$$|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \approx r - \mathbf{n} \cdot \mathbf{r}' \quad \text{kde} \quad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}}{r}, \quad r \equiv |\mathbf{r}|$$

a pre funkciu  $G_+$  dostaneme asymptotický tvar pre

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rightarrow -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{iqr}}{r} e^{iq\mathbf{n} \cdot \mathbf{r}'} \quad \text{pre} \quad r \rightarrow \infty$$

Po dosadení do (5) dostaneme asymptotický tvar pre  $\psi(\mathbf{r})$ .

$$\psi(\mathbf{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{iqz} - \frac{1}{4\pi} \frac{e^{iqr}}{r} \int e^{iq\mathbf{n} \cdot \mathbf{r}'} U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d^3r' \quad (6)$$

kde  $\mathbf{n}$  je jednotkový vektor v smere  $(\vartheta, \varphi)$ . Porovnaním so vzťahom (2) vidíme nielen to, že (6) má správnu asymptotiku, ale i to, že amplitúda rozptylu je daná vzťahom

$$f(\vartheta, \varphi) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int e^{iq\mathbf{n} \cdot \mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d^3r' \quad (7)$$

kde sme od  $U(\mathbf{r})$  prešli naspäť k  $V(\mathbf{r})$  a označili sme  $\mathbf{q}' = q\mathbf{n}$ , kde  $\mathbf{n}$  je jednotkový vektor v smere, v ktorom sa pohybuje rozptýlená častica.

Aby formulka (7) bola skutočne užitočná pre praktické výpočty, musíme ešte nájsť poruchovú (alebo inú) metódu riešenia rovnice (5). Poruchové riešenie nájdeme okamžite, ak zavedieme parameter  $\lambda$  a namiesto  $U$  píšeme v (5)  $\lambda U$ . Zároveň s tým urobíme rozvoj

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_0 + \lambda \psi_1 + \lambda^2 \psi_2 + \dots \quad (8)$$

Po dosadení do (5) a porovnaní koeficientov pri jednotlivých mocninách  $\lambda$  máme hneď

$$\begin{aligned}\psi_0 &= e^{iqx} \\ \psi_1 &= \int G_+(r, r') \psi_0(r') d^3 r' \\ &\vdots \\ \psi_{n+1} &= \int G_+(r, r') \psi_n(r') d^3 r'\end{aligned}\quad (8')$$

Najnižšie priblíženie pre amplitúdu rozptylu dostaneme, ak do (7) dosadíme na pravú stranu za  $\psi(r)$  len

$$\psi_0(r) = e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$$

kde  $\mathbf{q}$  je vektor so smerom v osi  $z$  a  $|\mathbf{q}| = q$ . Tak dostaneme

$$f(\vartheta, \varphi) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int e^{-i\mathbf{q}'\cdot\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'} d^3 r' \quad (9)$$

čo je prvá Bornova aproximácia pre amplitúdu rozptylu na potenciáli. Poznamenajme, že ďalšie priblíženia k vlnovej funkcii  $\psi(r)$  dostaneme, ak dosadíme (8') do (8) a položíme  $\lambda = 1$ .

Takto máme

$$\begin{aligned}\psi(r) &= \psi_0(r) + \int G_+(r, r') U(r') \psi_0(r') dr' + \\ &+ \iint G_+(r, r') U(r') G_+(r', r'') U(r'') \psi_0(r'') dr' dr'' \dots\end{aligned}\quad (10)$$

čo niekedy zapisujeme symbolicky ako

$$\begin{aligned}\psi &= \psi_0 + G_+ U \psi_0 + G_+ U G_+ U \psi_0 + G_+ U G_+ U G_+ U \psi_0 + \dots = \\ &= \sum_0^\infty (G_+ U)^n \psi_0\end{aligned}\quad (11)$$

Výrazy (10) a (11) treba chápať len ako symbolické zápisy radu (10).

Vo formálnej teórii rozptylu sa s jednotlivými operátormi pracuje starostlivejšie a potom chápeme  $U$ ,  $G_+$  ako operátory a rad v (11) môžeme formálne sčítať. Tu sa s tým ale nebudeme podrobnejšie zaoberať.

## 7.7 RUTHERFORDOVA FORMULA

V tomto článku spočítame amplitúdu rozptylu v najnižšom priblížení pre rozptyl nabitkej častice na potenciáli budenom druhou nabitou časticou nachádzajúcou sa v začiatku súradnicovej sústavy. Potenciálna energia interakcie oboch častíc je vtedy

$$V(r) = \frac{e_1 e_2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \equiv \frac{e'_1 e'_2}{r} \quad (1)$$



Pri výpočte sa na jednom mieste vyskytujú formálne ťažkosti, ktoré sa našťastie dajú odstrániť fyzikálne dobre motivovaným spôsobom. V skutočnosti aj v tom najdokonalejšom vákuu je Coulombovská interakcia dvoch nábojov tienená polarizáciou prostredia, takže realistický tvar potenciálnej energie je

$$V(r) = \frac{e_1' e_2'}{r} e^{-\lambda r} \quad (2)$$

kde  $\lambda > 0$ . Ak je vákuum naozaj dobré, potom môžeme previesť výpočty pre  $\lambda > 0$  a v konečných vzťahoch urobiť limitu  $\lambda \rightarrow 0$ . Potenciál typu (2) je však sám osebe zaujímavý v kontexte jadrovej fyziky, kde sa  $V(r)$  v tvare

$$V(r) = g \frac{e^{-\mu r}}{r} \quad (3)$$

nazýva Yukawovým potenciálom,  $g$  sa nazýva väzbou konštantnou a  $r_0 = 1/\mu$  je dosahom jadrových síl.

Spočítame teda teraz Bornovu aproximáciu na potenciáli (3) a potom v konečných výsledkoch sa zamenou  $g \rightarrow e_1' e_2'$  a limitou  $\mu \rightarrow 0$  dostaneme k výrazu platnému pre rozptyl častice na Coulombovom potenciáli. Ak vlnový vektor v smere dopadajúcej častice označíme ako  $\mathbf{q}$  a v smere rozptýlenej častice ako  $\mathbf{q}'$ , máme podľa predchádzajúceho článku

$$f(\vartheta, \varphi) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} g \int e^{-i(\mathbf{q}' - \mathbf{q}) \cdot \mathbf{r}} \frac{e^{-\mu r}}{r} d^3r \quad (4)$$

Pri integrovaní je užitočné označiť

$$\boldsymbol{\kappa} = \mathbf{q} - \mathbf{q}'$$

a použiť sférické súradnice  $(\Theta, \Phi)$  v  $r$ -priestore s osou  $z$  v smere vektora  $\boldsymbol{\kappa}$ . Integrácia cez uhol  $\Phi$  je triviálna, lebo podintegrálna funkcia od  $\Phi$  nezávisí. Pre integrál cez uhol  $\Theta$  máme

$$\begin{aligned} f(\vartheta) &= -\frac{gm}{\hbar^2} \int_0^\infty r e^{-\mu r} dr \int_0^\pi e^{-i\kappa r \cos\Theta} \sin\Theta d\Theta = \\ &= -\frac{gm}{\hbar^2} \int_0^\infty r e^{-\mu r} dr \int_{-1}^1 e^{-i\kappa r u} du = \\ &= -\frac{gm}{\hbar^2} \int_0^\infty r e^{-\mu r} dr \frac{1}{i\kappa} [e^{i\kappa r} - e^{-i\kappa r}] = \\ &= i \frac{gm}{\hbar^2 \kappa} \int_0^\infty e^{-\mu r} dr [e^{(-\mu+i\kappa)r} - e^{(-\mu-i\kappa)r}] \end{aligned} \quad (5)$$

Tu sa objavuje spomínaná ťažkosť. Pri  $\mu = 0$  uvedené integrály divergujú. Pri

$\mu \neq 0$  integrál vykonáme ľahko a máme

$$f(\vartheta) = \frac{2gm}{\hbar^2} \frac{1}{\mu^2 + \kappa^2} \quad (6)$$

Možno sa presvedčiť o tom (stačí si nakresliť obrázok), že uhol rozptylu  $\vartheta$  súvisí s  $\kappa = |\mathbf{q} - \mathbf{q}'|$  vzťahom

$$\kappa = 2q \sin \frac{\vartheta}{2} \quad (7)$$

Stačí si totiž uvedomiť, že  $q = |\mathbf{q}| = |\mathbf{q}'|$  a uhol  $\vartheta$  je uhol medzi vektormi  $\mathbf{q}$ ,  $\mathbf{q}'$ . Po dosadení (7) do (6) máme

$$f(\vartheta) = \frac{2gm}{\hbar^2} \frac{1}{\mu^2 + 4q^2 \sin^2(\vartheta/2)} \quad (8)$$

Coulombov prípad odtiaľto dostaneme zámennou  $g \rightarrow e_1' e_2'$  a limitou  $p \rightarrow 0$ . Ak navyše položíme  $q^2 \hbar^2 / 2m = E$ , kde  $E$  je energia dopadajúcej častice, máme

$$f(\vartheta) = \frac{e_1' e_2'}{4E} \frac{1}{\sin^2(\vartheta/2)} \quad (9)$$

Príslušný diferenciálny účinný prierez je

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\vartheta)|^2 = \left( \frac{e_1' e_2'}{4E} \right)^2 \frac{1}{\sin^4(\vartheta/2)} \quad (10)$$

čo je práve známa Rutherfordova formula použitá pri klasických experimentoch s rozptylom  $\alpha$ -častíc na jadrách zlata. Zhodou okolností Rutherfordova analýza založená na klasickom výpočte (ide o rok 1912) vedie v tomto prípade k rovnakému výsledku ako prvé priblíženie v kvantovej mechanike.

Pre úplnosť ešte uvedieme výsledok pre celkový prierez rozptylu častice na Yukawovom potenciáli. Podľa článku 7.2 platí

$$\sigma = \int |f(\vartheta)|^2 d\Omega = \int |f(\vartheta)|^2 \sin \vartheta d\vartheta d\varphi$$

Po dosadení za  $f(\vartheta)$  z rovnice (8) a integrovaní cez  $d\varphi$  máme

$$\sigma = (2\pi) \left( \frac{2gm}{\hbar^2} \frac{1}{4g^2} \right)^2 \int_0^\pi \frac{\sin \vartheta d\vartheta}{[a^2 + \sin^2 \vartheta/2]^2}$$

kde

$$a = \frac{\mu^2}{4q^2}$$

Integrál spočítame substitúciou  $\sin(\vartheta/2) = t$  a napokon dostaneme

$$\sigma = 4\pi \left( \frac{2gm}{\hbar^2} \right)^2 \frac{1}{[\mu^2 + 4q^2]\mu^2} \quad (11)$$

Pre coulombovský potenciál by sme mali urobiť zámenu  $g \rightarrow e_1 e_2$  a limitu  $m \rightarrow 0$ . Dostávame tak nekonečný účinný prierez, čo súvisí s pomalým poklesom coulombovského potenciálu pre  $r \rightarrow \infty$ .

## 7.8 FORMFAKTOR

V predchádzajúcom článku sme skúmali rozptyl nabitej častice na bodovom náboji. Teraz sa budeme zaoberať s trochu zložitejším problémom – s rozptylom nabitej častice na potenciáli budenom spojitým rozložením náboja  $e_2 \rho(\mathbf{r})$ . Pritom rozloženie hustoty náboja normujeme tak, aby platilo

$$\int \rho(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r} = 1 \quad (1)$$

Potenciálna energia interakcie dopadajúcej častice s nábojom  $e_1$  a daného rozloženia náboja bude

$$V(\mathbf{r}) = e_1 e_2 \int \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3 \mathbf{r}' \quad (2)$$

Pre Bornovu aproximáciu dostaneme

$$\begin{aligned} f(\mathbf{q}', \mathbf{q}) &= -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int e^{-i(\mathbf{q}' - \mathbf{q}) \cdot \mathbf{r}} V(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r} = \\ &= \frac{2m e_1 e_2}{4\pi \hbar^2} \int d^3 \mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}') \int \frac{e^{-i(\mathbf{q}' - \mathbf{q}) \cdot \mathbf{r}}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3 \mathbf{r} \end{aligned}$$

V druhom integráli na pravej strane prejdeme k novej premennej  $\mathbf{t}$  substitúciou

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}' + \mathbf{t}$$

a dostaneme

$$f(\mathbf{q}', \mathbf{q}) = -\frac{2m e_1 e_2}{4\pi \hbar^2} \int d^3 \mathbf{r}' e^{-i(\mathbf{q}' - \mathbf{q}) \cdot \mathbf{r}'} \rho(\mathbf{r}') \int \frac{e^{-i(\mathbf{q}' - \mathbf{q}) \cdot \mathbf{t}}}{t} d^3 \mathbf{t}$$

Pôvodný dvojný integrál takto prešiel na súčin dvoch integrálov. Predintegrálne faktory spolu s druhým z integrálov dávajú práve amplitúdu rozptylu na bodovom náboji, prvý z integrálov nazývame formfaktor.

$$F(\mathbf{q} - \mathbf{q}') = \int d^3 \mathbf{r}' e^{i(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \cdot \mathbf{r}'} \rho(\mathbf{r}') \quad (3)$$

Amplitúdu rozptylu môžeme písať ako súčin

$$f(\mathbf{q}', \mathbf{q}) = f_0(\mathbf{q}', \mathbf{q})F(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \quad (4)$$

kde  $f_0$  označuje amplitúdu rozptylu na bodovom náboji danú rovnicou (6.9) a druhý člen je spomínaný formfaktor. Pre diferenciálny účinný prierez máme analogicky

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_0 |F(\mathbf{q} - \mathbf{q}')|^2 \quad (5)$$

Pričom index 0 opäť označuje veličinu vzťahujúcu sa na bodový náboj.

Táto jednoduchá analýza má viacero praktických aplikácií. Prvou z nich je možnosť získania určitých experimentálnych informácií o rozdelení náboja v ťažkých atómoch. Ak totiž skúmame takýto rozptyl, nájdeme  $d\sigma/d\Omega$  a predelíme ho výrazom  $(d\sigma/d\Omega)_0$  dostaneme priamo druhú mocninu formfaktora. Rozdelenie náboja v atóme sa skladá z dvoch častí: prvou je jadro umiestnené v začiatku súradnicovej sústavy a jeho hustota náboja je opísaná výrazom  $eZ\delta^3(\mathbf{r})$ . Ďalej máme elektrónový oblak atómu s hustotou opísanou výrazom  $-eZ\rho(\mathbf{r})$ , kde  $\rho(\mathbf{r})$  je normované podľa (1). Predchádzajúcu analýzu môžeme teraz takmer doslova zopakovať a pridáme k vzťahu (4) iba s týmito zmenami: Namiesto  $e'_2$  píšeme  $-Ze'$  a namiesto  $F(\mathbf{q} - \mathbf{q}')$  daného rovnicou (3) dostaneme

$$\tilde{F}(\mathbf{q} - \mathbf{q}') = F(\mathbf{q} - \mathbf{q}') - 1 \quad (6)$$

kde druhý člen je Fourierovým obrazom  $\delta^3(\mathbf{r})$  opisujúcej rozloženie náboja jadra. Pre diferenciálny účinný prierez a amplitúdu rozptylu stačí nahradiť vo vzťahu (4) a (5) formfaktor  $F$  formfaktorom  $\tilde{F}$ . Zo štúdia rozptylu elektrónov na atómoch potom môžeme získať informáciu o veličine

$$|\int d^3r e^{i\mathbf{\kappa}\cdot\mathbf{r}} \rho(\mathbf{r}) - 1| \quad (7)$$

kde  $\mathbf{\kappa} = \mathbf{q} - \mathbf{q}'$  je zmena vlnového vektora pri rozptyle.

Informácia, ktorú takto môžeme o rozložení náboja získať, závisí podstatne od vlnovej dĺžky  $\lambda$  dopadajúcich elektrónov. Veličina  $|\mathbf{\kappa}|$  je totiž aj pri veľkých uhloch rozptylu rádovo rovná  $1/\lambda$  a výraz  $\mathbf{\kappa}\cdot\mathbf{r}$  v exponente v (7) je potom rádovo rovný  $a/\lambda$ , kde  $a$  je rozmer atómu. Pri  $a/\lambda < 1$  možno exponent rozvinúť a pri zachovaní prvých troch členov máme

$$\begin{aligned} \int d^3r e^{-i\mathbf{\kappa}\cdot\mathbf{r}} \rho(\mathbf{r}) &\approx \int d^3r [1 + i\mathbf{\kappa}\cdot\mathbf{r} - \frac{1}{2}(\mathbf{\kappa}\cdot\mathbf{r})^2] \rho(\mathbf{r}) \approx \\ &\approx 1 - \frac{1}{2} \int d^3r (\mathbf{\kappa}\cdot\mathbf{r})^2 \rho(\mathbf{r}) \approx 1 - \frac{1}{6} \langle r^2 \rangle \kappa^2 \end{aligned}$$

kde sme pri prvom člene využili normovanie  $\rho(\mathbf{r})$ , druhý člen v hranatej zátvorke dal nulu, lebo predpokladáme sféricky symetrické rozloženie náboja a pri treťom

člene sme opäť využili sférické rozloženie náboja a dostali sme

$$\int d^3r (\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r})^2 \rho(\mathbf{r}) = \frac{1}{3} \kappa^2 \int d^3r r^2 \rho(\mathbf{r})$$

kde integrál na pravej strane označuje stredný kvadratický polomer rozloženia náboja elektrónov. Pri rozptyle pomalých elektrónov na atóme teda meriame formfaktor v priblížení

$$\tilde{F}(\boldsymbol{\kappa}) \approx -\frac{1}{6} \kappa^2 \langle r^2 \rangle \quad (8)$$

Na získanie podrobnejšej informácie preto potrebujeme elektróny s krátkou vlnovou dĺžkou.

Druhým a podstatným predpokladom je to, aby atóm po rozptyle ostal v základnom stave. Jedine v tomto prípade môžeme totiž považovať rozptyl elektrónu za rozptyl na statickom rozložení náboja.<sup>116</sup>

Na veľmi podobnom princípe boli založené experimenty vykonané Hofstädterovou skupinou v Stanforde začiatkom šesťdesiatych rokov. Skupina študovala rozptyl rýchlych elektrónov na atómových jadrách i na protónoch a neutrónoch a získala informácie o tom, ako je v nich rozdelený elektrický náboj. Analýza bola, samozrejme, o čosi zložitejšia, lebo elektrón musel byť opisovaný relativisticky, ale princíp bol rovnaký. Od týchto prác je známe, že  $\langle r^2 \rangle^{1/2}$  pre protón je okolo  $0,7 \cdot 10^{-15}$  m a toto bol jeden z prvých argumentov v prospech neelementárnosti protónu.

Poznamenajme ešte, že analýzou iných experimentov s rozptylom elektrónov na protónoch, t. j. štúdiom prípadov rozptylu, pri ktorom sa mení stav protónu (nepružný rozptyl) bola tiež v Stanforde koncom šesťdesiatych a začiatkom sedemdesiatych rokov získaná informácia o tom, z čoho sa asi protón skladá. Ale o tom tu hovoríť nebudeme.

## 7.9 PRÍKLADY A PROBLÉMY

1. Vypočítajte integrály

$$\int_{-\infty}^{\infty} \sin x \cdot \delta\left(x^2 - \frac{\pi}{4}\right) dx, \quad \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \delta(e^x - 2) dx$$

2. Nájdite  $\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{x^2 + a^2}$  integrovaním v komplexnej rovine.

<sup>116</sup> Aj vtedy zanedbávame tzv. výmenné efekty spočívajúce, zhruba povedané, v tom, že dopadajúci elektrón si vymení úlohu s jedným z elektrónov v atóme.

3. Dokážte, že platí

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{x + i\epsilon} = P \frac{1}{x} - i\pi \delta(x)$$

kde limitu chápeme v zmysle distribúcií,  $P$  má význam hlavnej hodnoty integrálu.

4. V tejto kapitole sme sa podrobne zaoberali riešeniami rovníc

$$\Delta G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

$$(\Delta + q)G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

kde  $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$  je Laplaceov operátor v trojrozmernom priestore.

Sformulujte analogický prípad pre jednorozmernú a dvojrozmernú úlohu pre prvú z týchto rovníc a nájdite príslušné Greenove funkcie. Porozmýšľajte aj o tom, ako by ste pristúpili k riešeniu druhej z uvedených rovníc v jedno- a dvojrozmernom prípade.

5. Nájdite amplitúdu rozptylu v Bornovej aproximácii pre rozptyl na potenciálovej jame

$$V(\mathbf{r}) = -V_0 \quad \text{pre } r \leq a$$

$$V(\mathbf{r}) = 0 \quad \text{pre } r > a.$$

6. Nájdite Bornovu aproximáciu pre amplitúdu rozptylu na Yukawovom potenciáli v situácii, keď dĺžka vlny dopadajúcej častice je oveľa väčšia ako dosah potenciálu. Porovnajte výsledok s Bornovou amplitúdou pre rozptyl na potenciáli  $V(\mathbf{r}) = -B\delta^3(\mathbf{r})$ . Možno v takýchto situáciách určiť tvar potenciálu z experimentálnych údajov o rozptyle – prediskutujte fyzikálnu stránku problému.

7. Nájdite formfaktory príslušné k nasledujúcim trom rozloženiam náboja

a)  $\rho(\mathbf{r}) = \rho_0$  pre  $r \leq a$ ;  $\rho(\mathbf{r}) = 0$  pre  $r > a$

b)  $\rho(\mathbf{r}) = Ar^{-1}\exp(-\kappa r)$

c)  $\rho(\mathbf{r}) = B\exp(-\kappa r)$

8. Predstavte si, že máte navrhnuť experiment, v ktorom by sa pomocou rozptylu elektrónu na atómoch daného prvku určoval približne polomer rozdelenia náboja v atóme. K dispozícii máte urýchľovač elektrónov, ktorý dodáva zväzok s intenzitou  $10^{11}$  elektrónov za sekundu a energiu zväzku môžete voliť ľubovoľne, ďalej máte detektor v tvare valca o dĺžke 2 m a so základňou s priemerom 20 cm. Detektor určuje smer vyletujúceho elektrónu a tiež jeho energiu. Napokon máte nádobu, v ktorej môžete mať atómy študovaného plynu. Máte vhodne vybrať energiu (prípadne energiu) dopadajúceho zväzku, rozmery nádoby, v ktorej máte plyn; hustotu plynu (tlak), uhly, pod ktorými budete detegovať rozptýlené elektróny a dobu, počas ktorej budete merať počet častíc zachytených detektorom za daných podmienok. Chyba v určení počtu elektrónov registrovaných detektorom je  $\sqrt{N}$ , kde  $N$  je počet registrovaných častíc (toto neplatí vždy, ale je zväčša dobrým odhadom). Urobte najprv rýchle približné odhady a až potom rozmýšľajte o tom, čo všetko ste zanedbali, a čo by bolo potrebné upresniť a domyslieť. Začnite z toho, že načrtnete očakávané účinné prierezy.