

16 ZRÁŽKY ČASTÍC

16.1 ÚVOD

Podstatná časť informácie o štruktúre častíc a o ich interakciách pochádza z experimentálnych údajov o zrážkach častíc. Časť kvantovej mechaniky zaoberajúca sa popisom zrážok častíc sa niekedy nazýva *teóriou rozptylu*. Poznamenajme hneď, že pre zjednodušenie terminológie budeme objekty zúčastňujúce sa na zrážke nazývať *časticami* bez ohľadu na to, či ide o elementárne objekty, ako napr. elektrón, alebo komplikovanejšie sústavy, ako atómy alebo jadrá.

V tejto kapitole sa zoznámime len s niekoľkými základnými metódami teórie rozptylu. Ďalšie podrobnosti či metódy čitateľ nájde v špeciálnej literatúre.

Na úvod si krátko zopakujeme to, čo už o rozptyle vieme zo siedmej kapitoly, povieme si niekoľko slov o vzťahu medzi laboratórnou sústavou a sústavou hmotného streda a pridáme terminologické poznámky.

Pri typickom zrážkovom experimente dopadá zväzok častíc, pohybujúci sa, povedzme, v kladnom smere osi z na časticu terčika. Pre zjednodušenie opisu volíme začiatok súradnicovej sústavy v mieste, kde sa nachádza častica terčika. Rozptýlenú časticu registrujeme detektormi umiestnenými okolo terčika. Najjednoduchší prípad pružného rozptylu je charakterizovaný diferenciálnym účinným prierezom $d\sigma/d\Omega$, ktorý je daný vzťahom

$$dn = \frac{d\sigma}{d\Omega} jN d\Omega \quad (1)$$

kde dn je počet rozptýlených častíc zachytených detektorom pokrývajúcim priestorový uhol $d\Omega$, j je hustota prúdu dopadajúcich častíc, N je počet častíc v terčíku. Vzťah (1) platí za predpokladu, že terčik je „tenký“ a pri interakcii dopadajúcej častice s terčíkom nenastáva viacnásobný rozptyl.

Kvantovomechanický opis pružného rozptylu je nasledujúci. Ak je častica terčika ťažká, môžeme zanedbať jej „odraz“ pri interakcii a uvažujeme rozptyl dopadajúcej častice na statickom rozptylovom centre. Príslušná bezčasová Schr je

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

Energiu častice môžeme vyjadriť ako $E = \hbar^2 k^2 / 2m$, kde m je hmotnosť častice a k je absolútna hodnota vlnového vektora ďaleko od rozptylového centra. Ak ďalej položíme $V(\mathbf{r}) = (\hbar^2 / 2m) U(\mathbf{r})$, prepíšeme (2) na tvar

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

Riešenie odpovedajúce problému rozptylu má pri $r \rightarrow \infty$ tvar

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

kde prvý člen na pravej strane predstavuje rovinnú dopadajúcu vlnu a druhý člen je rozbiehavou vlnou. Diferenciálny účinný prierez je jednoducho viazaný s tzv. amplitúdou rozptylu $f(\vartheta, \varphi)$. Platí

$$\sigma(\vartheta, \varphi) \equiv \frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\vartheta, \varphi)|^2 \quad (5)$$

Pri riešení rovnice (3) je veľmi užitočný jej prepis pomocou (bezčasovej) Greenovej funkcie, ktorá je riešením rovnice

$$(\Delta + k^2)G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (6)$$

Táto rovnica nemá jednoznačné riešenie, to riešenie, ktoré obsahuje v asymptotike iba rozbiehavé vlny, označujeme ako $G_+(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. Rovnica (3) spolu s požiadavkou na asymptotiku typu (4) je potom ekvivalentná integrálnej rovnici

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{ikz} + \int G_+(\mathbf{r} - \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}' \quad (7)$$

Greenova funkcia $G_+(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ má explicitný tvar

$$G_+(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}}{k^2 + i\varepsilon - k'^2} d^3\mathbf{k}' \quad (8a)$$

kde $\varepsilon > 0$ označuje spôsob obchádzania singularitu pri integrovaní v komplexnej rovine. Explicitný výpočet v kapitole 7 viedol k výsledku

$$G_+(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = -\frac{e^{ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (8b)$$

Keby sme zmenili znamienko pri ε v rovnici (8a), dostali by sme Greenovu funkciu $G_-(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, ktorá obsahuje na rozdiel od (8b) iba faktor $\exp[-ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|]$, čo pri $r \gg r'$ odpovedá iba zbiehavým sférickým vlnám.

Poruchovým riešením rovnice (7) sme prišli k výrazu pre amplitúdu rozptylu v Bornovej aproximácii

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

kde \mathbf{k} je vlnový vektor dopadajúcej častice a \mathbf{k}' je to isté pre rozptýlenú časticu.

Pri štúdiu nestacionárnej poruchovej teórie v kapitole 9 sme výraz pre Bornovu aproximáciu odvodili ešte raz, pričom sme vychádzali z vyjadrenia

$$W_{km} = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{km}|^2 \rho(E_k) \quad (9b)$$

pre pravdepodobnosť prechodu zo stavu m do stavov k za jednotku času. Tu H'_{km} označuje maticový element poruchy medzi začiatočným a koncovým stavom a $\rho(E_k)$ je hustota stavov, t. j. počet koncových stavov na jednotkový energetický interval. Energia E_k je daná zákonom zachovania. Pre prípad pružného rozptylu na silovom centre s potenciálnou energiou $V(\mathbf{r})$ zo vzťahu (9b) dostaneme pre diferenciálny účinný prierez to isté, čo obdržíme ako druhú mocninu absolútnej hodnoty $f(\vartheta, \varphi)$ danej vzťahom (9a).

Keď sme vyššie hovorili o typickom rozptylovom experimente, používali sme laboratórnu sústavu, t. j. sústavu, v ktorej je častica terčiku pred zrážkou v pokoji. Z hľadiska teoretického opisu zrážky je laboratórna sústava jednoduchá iba vtedy, ak je častica terčika veľmi ťažká a rozptyl dopadajúcej častice môžeme opísať priamo SchR (2).

Ak sú hmotnosti oboch častíc porovnateľné, je pre teoretický opis rozptylu jednoduchšia sústava hmotného stredu. Z kapitoly 4 už vieme, že SchR pre dve častice s interakciou $V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ závisiacou iba od relatívnej vzdialenosti častíc môžeme separovať zavedením súradnice hmotného stredu $\mathbf{R} = (m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2)/(m_1 + m_2)$ a relatívnej súradnice $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$. SchR pre relatívnu súradnicu má rovnaký tvar ako jednočasticová SchR len namiesto hmotnosti častice vystupuje redukovaná hmotnosť $\mu = m_1m_2/(m_1 + m_2)$.

V sústave hmotného stredu preto platia všetky vzťahy už uvedené v tomto článku a riešením SchR (2) s asymptotikou (4) nájdeme diferenciálny účinný prierez v sústave hmotného stredu zrážajúcich sa častíc. Aby sme ho mohli porovnať s experimentálnymi údajmi, musíme ho previesť do laboratórnej sústavy. Vyberme osi oboch sústav navzájom rovnobežné; veličiny v sústave S^* (hmotného stredu) budeme označovať hviezdičkou, veličiny v sústave S (laboratórnej) nebudú mať zvláštny index.

Najprv nájdeme rýchlosť S^* voči S . Hmotný stred zrážajúcich sa častíc má v S súradnicu $\mathbf{R} = (m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2)/(m_1 + m_2)$ a pohybuje sa rýchlosťou

$$\boldsymbol{\beta} = \frac{m_1\mathbf{v}_1 + m_2\mathbf{v}_2}{m_1 + m_2} = \frac{m_1\mathbf{v}_1}{m_1 + m_2}$$

pretože $\mathbf{v}_2 = 0$ v laboratórnej sústave. V ďalšom budeme predpokladať, že \mathbf{v}_1 má smer kladnej osi z .

Predpokladajme, že ako produkt zrážky vznikne častica pohybujúca sa v rovine x, z v laboratórnej sústave. Jej zložky rýchlosti označíme ako v_x, v_z . Pre vzťah medzi vyjadrením rýchlosti v S a S^* platí:

$$v_x = v_x^*$$

$$v_z = v_z^* + \beta$$

Po vynásobením hmotnosťou a zavedení označenia $p_x = mv_x = p \sin \vartheta, p_z = mv_z =$

= $p \cos \vartheta$ kde $p \equiv |\mathbf{p}|$, máme

$$\begin{aligned} p \sin \vartheta &= p^* \sin \vartheta^* \\ p \cos \vartheta - m\beta &= p^* \cos \vartheta^* \end{aligned}$$

pričom označenie v S^* je zavedené rovnako ako v S .

Predelením predchádzajúcich rovníc dostaneme vzťah medzi ϑ a ϑ^*

$$\operatorname{tg} \vartheta^* = \frac{p \sin \vartheta}{p \cos \vartheta - m\beta} \quad (10)$$

a celkom analogickým postupom by sme získali vzťah

$$\operatorname{tg} \vartheta = \frac{p^* \sin \vartheta^*}{p^* \cos \vartheta^* - m\beta} \quad (11)$$

Diferenciálny účinný prierez je v oboch sústavách S aj S^* definovaný ako počet častíc rozptýlených do jednotkového priestorového uhla za jednotku času. Ak si priestorový uhol predstavíme ako veličinu experimentálne definovanú istým detektorom, vidíme, že počet častíc registrovaný detektorom musí byť rovnaký, nezávisle od toho²⁴⁶, či opisujeme experiment v sústave S alebo S^* . Príslušné priestorové uhly označíme ako

$$d\Omega = \sin \vartheta d\vartheta d\varphi \quad d\Omega^* = \sin \vartheta^* d\vartheta^* d\varphi^*$$

a diferenciálny účinný prierez označíme ako $\sigma(\vartheta, \varphi)$ resp. $\sigma^*(\vartheta^*, \varphi^*)$ (pozri tiež rovnicu (5)) a máme

$$\sigma^*(\vartheta^*, \varphi^*) \sin \vartheta^* d\vartheta^* = \sigma(\vartheta, \varphi) \sin \vartheta d\vartheta \quad (12)$$

Tu sme už využili vzťah $d\varphi = d\varphi^*$. Z rovnice (12) vyplýva

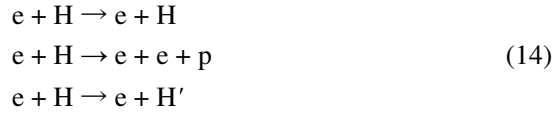
$$\sigma(\vartheta, \varphi) = \sigma^*(\vartheta^*, \varphi^*) \cdot \left| \frac{d \cos \vartheta^*}{d \cos \vartheta} \right| \quad (13)$$

Ostatný faktor v (13) môžeme spočítať explicitne pomocou vzťahov (10) alebo (11). Podrobnosti čitateľ nájde v špeciálnej literatúre²⁴⁷.

²⁴⁶ Pripomeňme si, že diferenciálny účinný prierez je definovaný vzťahom (1), v ktorom sa pri prechode zo sústavy S do S^* nemení dn (lebo je definované počtom „šľuknutí“ detektora), nemení sa N a nemení sa ani j (lebo j je úmerné relatívnej rýchlosti častíc $|v_1 - v_2|$ a hustote dopadajúceho zväzku).

²⁴⁷ Odporúčame Messiahovu učebnicu [10] alebo monografiu Baldin, A. M. – Goldanskij, V. I. – Rozental, I. A.: Kinematika jaderných reakcij. Moskva, 1959, kde možno nájsť aj príslušné relativistické transformácie.

Napokon ešte terminologická poznámka. Doteraz sme podrobnejšie hovorili iba o pružnom rozptyle, t. j. o zrážke, pri ktorej sa nemení vnútorná štruktúra častíc. Veľmi často sa ale stáva, že ako výsledok zrážky sa objavia iné častice, ako boli tie, čo do zrážky vstupovali. V atómovej fyzike sa môžeme, napríklad, zaoberať so zrážkou elektrónu s atómom vodíka. Výsledkom zrážky môže byť opäť elektrón a atóm vodíka, alebo dva elektróny a protón, alebo elektrón a atóm vodíka v excitovanom stave. Tieto procesy môžeme zapísať nasledovne:



V jadrovej fyzike môžeme ako príklad vybrať zrážku protónu s jadrom deutéria. Podobne ako v (14) výsledky zrážky zapíšeme nasledovne:



V jadrovej fyzike sa často zrážka nazýva reakciou a o jednotlivých procesoch hovoríme ako o *kanáloch reakcie*. Vo fyzike elementárnych častíc pri vysokých energiách je situácia ešte komplikovanejšia a pri danom type zrážky je mnoho možných konečných stavov.

16.2 ROZKLAD AMPLITÚDY ROZPTYLU DO PARCIÁLNYCH VLŇN

Jadrové sily možno často úspešne aproximovať pomocou tzv. Yukawovho potenciálu

$$V(r) = g \frac{1}{r} \exp(-r/r_0) \quad (1)$$

kde $r_0 \approx 10^{-15}$ m. Jednoduchá poloklasická úvaha ukazuje, že pri rozptyle na takomto potenciáli hrá dôležitú úlohu iba niekoľko stavov s nízkymi hodnotami momentu hybnosti. Situácia je znázornená na *obr. 16.1*. Dopadajúca častica má hybnosť p a pohybuje sa rovnobežne s osou z vo vzdialenosti b od nej.

Potenciál $V(r)$ je veľký iba pre $r < r_0$. Silové centrum teda ovplyvní pohyb častice len vtedy, ak $b < r_0$. Absolútna veľkosť momentu hybnosti je však daná – v našom klasickom priblížení – vzťahom $L = pb$, a preto možno poznateľnú interakciu očakávať len vtedy, ak

$$\begin{aligned} \hbar l &\leq \hbar k r_0 \\ l &\leq k r_0 \end{aligned} \quad (2)$$

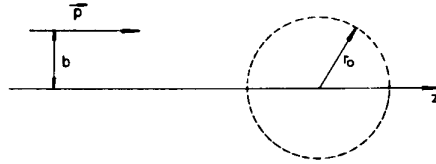
Uvedme hneď jednoduchý odhad založený na tejto nerovnosti. Predstavme si rozptyl neutrónu na protóne, pričom hybnosť neutrónu je $p = 280 \text{ MeV}/c$. Dosah jadrových síl je

$$r_0 \approx 1,4 \cdot 10^{-15} \text{ m} \approx \frac{\hbar}{m_\pi c} \approx \frac{\hbar c}{m_\pi c^2} \approx \frac{\hbar c}{140 \text{ MeV}}$$

Podľa vzťahu (2) máme

$$l \leq \frac{1}{\hbar} p r_0 \approx 280 \text{ MeV}/(c\hbar) \cdot \frac{\hbar c}{140 \text{ MeV}} \approx 2$$

a pri rozptyle sa uplatnia len stavy s dvomi alebo tromi najnižšími hodnotami l .



Obi. 16.1

Pri tomto odhade sme použili niekoľko elementárnych trikov z odhadov veličín jadrovej fyziky. Energia častíc v jadrovej fyzike sa najčastejšie vyjadruje v jednotkách $\text{MeV} = 10^6 \text{ eV}$. Hybnosti častíc sa udávajú v jednotkách MeV/c . Je užitočné pamätať si hodnoty $m_\pi c^2 = 140 \text{ MeV}$ a $\hbar/m_\pi c \approx 1,4 \cdot 10^{-15} \text{ m}$, kde m_π je hmotnosť π -mezónu. To, že Comptonova vlnová dĺžka π -mezónu a dosah jadrových síl spolu tesne súvisia, nie je náhoda, výmeny π -mezónov majú podstatnú úlohu v jadrových silách a vzťahy (1), (3) sa objavujú už v klasickej Yukawovej práci, v ktorej bola predpovedaná existencia π -mezónov.

Vráťme sa však späť ku kvantovomechanickému opisu problému rozptylu pre krátkodosahové potenciály. Potrebujeme metódu, ktorá by amplitúdu rozptylu rozložila do stavov s daným l a potom potrebujeme nejakým spôsobom zahrnúť zmeny vznikajúce v stavoch s najnižším l v dôsledku interakcie.

Diskusiu budeme spočiatku viesť na veľmi kvalitatívnej úrovni a až neskôr sa vrátíme k matematickým otázkam.

To, čo potrebujeme, je nájsť riešenie rovnice (1.3) s asymptotikou (1.4).

Ako ešte spomenieme podrobnejšie neskôr, môžeme rovinnú vlnu $\exp(ikz) = \exp(ikr \cos \vartheta)$ rozložiť do úplného systému Legendreových polynómov $P_l(\cos \vartheta)$ a pre $r \rightarrow \infty$ potom platí

$$e^{ikz} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) [e^{ikr} - e^{-i(kr-l\pi)}] \frac{P_l(\cos \vartheta)}{2ikr} \quad (4)$$

Predstavme si teraz, že takáto rovinná vlna „dopadá“ na rozptylové centrum. Rovinná vlna $\exp(ikz)$ je vzťahom (4) vyjadrená ako superpozícia rozbiehavých a zbiehavých sférických vln, pričom prvé z nich sú tie, ktoré obsahujú faktor $\exp(ikr)$ a druhé faktor $\exp(-ikr)$. Intuitívne je jasné, že rozptylové centrum nemôže zmeniť zbiehavé sférické vlny a pri rozbiehavých môže zmeniť iba fázu. Predpokladáme totiž, že dopadajúca častica nemá spin a potenciál $V(r)$ je sféricky symetrický, preto zachováva moment hybnosti a absolútna hodnota amplitúdy zbiehovej a rozbiehovej vlny s daným l musia byť preto rovnaké.

V dôsledku interakcie sa teda asymptotika rovinatej vlny môže zmeniť iba nasledovne:

$$\psi(r) \rightarrow \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) [e^{2i\delta_l} e^{ikr} - e^{-i(kr-l\pi)}] \frac{P_l(\cos\vartheta)}{2ikr} \quad (5)$$

Riešenie SchR (1.2) musí mať teda tvar (5), pričom výrazy $\delta_l = \delta_l(k)$ sú zatiaľ bližšie neurčené reálne čísla – o tom ako ich určiť ešte budeme hovoriť. Výraz (5) môžeme prepísať do tvaru (1.4) tak, že každý faktor $\exp(2i\delta_l)$ zapíšeme ako

$$e^{2i\delta_l} = [e^{2i\delta_l} - 1] + 1$$

Výrazy v hranatých zátvorkách prispievajú do druhého člena na pravej strane (1.4) a jednotky prispievajú do rovinatej vlny $\exp(ikz)$. Pre amplitúdu rozptylu $f(\vartheta, \varphi)$ v (1.4) takto dostaneme

$$f(\vartheta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2ik} P_l(\cos\vartheta) \quad (6)$$

Niekedy využívame identitu

$$e^{2i\delta_l} - 1 = 2ie^{i\delta_l} \sin\delta_l$$

a prepisujeme (6) do tvaru

$$f(\vartheta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{1}{k} e^{i\delta_l(k)} \sin\delta_l(k) P_l(\cos\vartheta) \quad (7)$$

Často sa používa tiež označenie

$$a_l(k) = \frac{1}{k} e^{i\delta_l(k)} \sin\delta_l(k) \quad (8)$$

príčom $a_l(k)$ sa nazýva *amplitúdou rozptylu* danej parciálnej vlny. Spravidla sa používa tradičná terminológia prebraná zo spektroskopie a parciálne vlny s $l = 0, 1, 2, 3, 4, 5, \dots$ sa nazývajú postupne *s, p, d, f, g, h, \dots parciálnymi vlnami*. Diferenciálny účinný prierez je daný vzťahom (1.5). Ak do tohto vzťahu dosadíme amplitúdu rozptylu danú rovnicou (7), máme

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{k^2} \left| \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l(k)} \sin\delta_l(k) P_l(\cos\vartheta) \right|^2 \quad (9)$$

Celkový účinný prierez dostaneme integrovaním (9) cez $d\Omega = \sin \vartheta d\vartheta d\varphi$. Ak využijeme podmienku ortonormovanosti Legendrových polynómov

$$\int_{-1}^1 P_n(z) P_m(z) dz = \frac{2}{2n+1} \delta_{nm} \quad (10)$$

kde $z = \cos \vartheta$, $dz = -\sin \vartheta d\vartheta$, dostaneme

$$\sigma_0 = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k) \quad (11)$$

Všimnime si, že možný príspevok k účinnému prierezu od l -tej parciálnej vlny je ohraničený hodnotou $4\pi(2l+1)/k^2$.

Amplitúdou rozptylu dopredu, alebo tiež amplitúdou dopredného rozptylu, nazývame výraz $f(\vartheta=0)$. Ak využijeme vzťah $P_l(1) = 1$ platný pre všetky l , dostaneme zo vzťahu (7) pre imaginárnu časť amplitúdy rozptylu dopredu vyjadrenie

$$\text{Im}f(\vartheta=0) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k) \quad (12)$$

Porovnaním s (11) dostaneme

$$\text{Im}f(\vartheta=0) = \frac{k}{4\pi} \sigma_0 \quad (13)$$

Tento vzťah sa nazýva *optická teoréma*. Odvodili sme ju pre pružný rozptyl. Jej význam je však v tom, že platí i pre reakcie prebiehajúce viacerými kanálmi. Na ľavej strane (13) je v takom prípade amplitúda rozptylu dopredu v pružnom kanáli a napravo stojí účinný prierez celej reakcie, zahrňujúci aj prierezy nepružných procesov.

Všimnime si teraz modifikácie predchádzajúceho formalizmu spôsobené prítomnosťou nepružných procesov. Aby sme mali aj určitú konkrétnu predstavu, môžeme mať na mysli napríklad interakciu nabitého π -mezónu s ťažkým jadrom. V takejto situácii sa π -mezón môže na jadre pružne rozptýliť, ale môže byť jadrom aj „pohltený“, pričom dochádza ku komplikovanej jadrovej reakcii vedúcej k zložitým konečným stavom reakcie. Z hľadiska pružného kanálu reakcie je takto pohltený π -mezón „stratený“. Predchádzajúci formalizmus sa potom zmení v jedinom mieste: pri „prechode“ od rovinatej vlny (4) na vlnovú funkciu (5) sa nemusí zachovávať absolútna hodnota koeficientu pri danej parciálnej vlne a pre asymptotické vyjadrenie $\psi(\mathbf{r})$ dostávame

$$\psi(\mathbf{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) [\eta_l e^{2i\delta_l} e^{ikr} - e^{-i(kr-l\pi)}] \frac{P_l(\cos \vartheta)}{2ikr}$$

kde η_l je reálne číslo spĺňajúce podmienku $0 \leq \eta_l \leq 1$. Toto číslo nazývame *elasticitou* danej parciálnej vlny.

Postupom ako predtým prídeme k vyjadreniu amplitúdy rozptylu v pružnom kanáli za prítomnosti nepružných procesov

$$f(\vartheta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{\eta_l e^{2i\delta_l} - 1}{2ik} P_l(\cos \vartheta) \quad (14)$$

Teraz sa vrátíme naspäť a ukážeme si najprv, ako možno dostať asymptotiku rozkladu rovinatej vlny použité v (4) a potom sa pozrieme na to, ako možno spočítať fázové posuny $\delta_l(k)$ pri rozptyle na potenciáli $V(r)$.

Ako už vieme z kapitoly 4, riešenie rovnice (1.2) pri sféricky symetrickom potenciáli $V(r)$ môžeme hľadať v separovanom tvare

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = \sum_{l,m} R_l(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad (16)$$

kde R_l spĺňa radiálnu SchR

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left\{ \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} R = 0 \quad (17)$$

Poznamenajme hneď, že situácia sa tu trochu odlišuje od tej, s ktorou sme sa stretli v kapitole 4. Tam sme sa totiž zaoberali s riešeniami SchR pre viazané stavy, zatiaľ čo tu sa zaujímate o rozptylové stavy. Rozklad (16) je celkom všeobecným rozkladom funkcie $\psi(r, \vartheta, \varphi)$ do úplného systému funkcií $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$. Výhodnosť tohto rozkladu pre náš prípad je v tom, že funkcie $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ sú vlastnými funkciami uhlovej časti Laplaceovho operátora $\nabla_{\vartheta, \varphi}^2$ vystupujúcej v rozklade ∇^2 do sférických súradníc. Vďaka tomuto a vďaka lineárnej nezávislosti sférických funkcií musí potom každá z funkcií $R_l(r)$ spĺňať rovnicu (17). V rovnici (17) je ešte užitočné urobiť úpravy spomínané medzi (1.2) a (1.3) a prepísať (17) do tvaru

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left\{ k^2 - U(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} R = 0 \quad (18)$$

Teraz už môžeme prejsť k rozkladu rovinatej vlny $\exp(ikz) = \exp(ikr \cos \vartheta)$. Táto funkcia je zrejme riešením rovnice (1.2) pri nulovom potenciáli. Navyše nezávisí od uhla φ , a preto v rozklade (16) sa objavia iba guľové funkcie, $Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \sim P_l \cos \vartheta$. Preto môžeme písať

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} R_l(r) P_l(\cos \vartheta) \quad (19)$$

pričom funkcie $R_l(r)$ sú riešením (18) pri nulovom potenciáli. Táto rovnica je ale Besselovou diferenciálnou rovnicou a jej riešeniami sú funkcie $j_l(kr)$, $n_l(kr)$. Pritom $j_l(kr)$ nemá singularitu v začiatku, ale $n_l(kr)$ ju má. V rozklade (19) teda nebudú vystupovať $n_l(kr)$ a môžeme písať

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} A_l j_l(kr) P_l(\cos \vartheta) \quad (20)$$

Ostáva nám ešte určiť koeficienty A_l ale to už je čisto technická otázka. Stačí napríklad násobiť (20) $P_l \cos \vartheta$, integrovať cez $\sin \vartheta d\vartheta$ a nájsť príslušný integrál v matematickej literatúre.²⁴⁸

Ako výsledok dostaneme

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \vartheta) \quad (21)$$

Pre $r \rightarrow \infty$ využijeme asymptotické vlastnosti²⁴⁹ Besselových funkcií (pozri Dodatok) a dostaneme vzťah (4).

Fázové posuny $\delta_l(k)$ možno v princípe určiť nasledujúcim spôsobom. Schrödingerova rovnica odpovedajúca rozptylu pri dopadajúcej rovinnnej vlne $\exp(ikz)$ neobsahuje závislosť od φ v okrajovej podmienke a nebude túto závislosť obsahovať ani v riešení. Preto môžeme riešenie SchR hľadať v tvare

$$\psi(r) = \sum_{l=0}^{\infty} R_l(r) P_l(\cos \vartheta) \quad (22)$$

kde $R_l(r)$ je riešením rovnice (18). Túto rovnicu je ešte užitočné prepísať tak, že za $R_l(r)$ dosadíme podľa vzťahu

$$R_l(r) = \frac{1}{r} \Phi_l(r) \quad (23)$$

Pre $\Phi_l(r)$ takto dostaneme diferenciálnu rovnicu

$$\Phi_l'' + k^2 \Phi_l - \frac{l(l+1)}{r^2} \Phi_l - U(r) \Phi_l = 0 \quad (24)$$

Podľa diskusie v kapitole 4 musíme vybrať to riešenie, ktoré je regulárne pre $r \rightarrow 0$. Pre $r \rightarrow 0$ dominuje v (24) prvý a tretí člen a ľahko sa presvedčíme o tom, že pre malé r máme dve riešenia, pričom prvé je úmerné r^{l+1} a druhé r^{-l} . Hľadáme teda riešenie (24), spĺňajúce podmienku

$$\Phi_l(0) = 0$$

²⁴⁸ Prakticky všetko čo treba, dá sa nájsť v Gradštejn, I. S. – Ryžik, I. M.: Tablicy integrálov, summ, rjadov i proizvedenij. Moskva, 1972, a v Bateman, H.– Erdély, A.: Higher Transcendental Functions. New York, 1953 (ruský preklad 1965).

²⁴⁹ Potrebný vzťah je $j_l(kr) \rightarrow \frac{1}{x} \sin(x - l\pi/2)$ pre $x \rightarrow \infty$.

Predpokladajme, že sme takéto riešenie našli. Pretože sme zatiaľ použili iba jednu podmienku ($\Phi_l(0) = 0$), bude toto riešenie určené jednoznačne až na multiplikatívnu konštantu. Podľa predchádzajúceho kvalitatívneho výkladu sa máme zaujímať o asymptotické správanie získaného riešenia v oblasti $r \rightarrow \infty$. Pre veľké r môžeme v (24) zanedbať tretí a štvrtý člen (predpokladáme, že $U(r)$ je krátkodosahový potenciál). Dostaneme tak rovnicu

$$\Phi_l'' + k^2 \Phi_l = 0 \quad (25)$$

Naše riešenie bude teda v asymptotike spĺňať jednoduchú rovnicu (25), ktorej riešenia poznáme – sú to harmonické funkcie. Asymptotický tvar riešenia rovnice (24) teda musí byť

$$\Phi_l(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} C_l \sin(kr + \alpha_l)$$

kde α_l je fáza, ktorá je naším riešením jednoznačne zafixovaná. Neurčitost' riešenia sa prejaví iba na multiplikatívnej konštante C_l ale nie na fáze α_l . Pretože asymptotický tvar riešenia chceme porovnávať so vzťahom (5), ukazuje sa výhodné odseparovať z fázy α_l člen $\frac{l\pi}{2}$ a písať asymptotiku v tvare

$$\Phi_l(r) \rightarrow C_l \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l(r)\right) \quad (26)$$

Zdôraznime, že fázové posuny δ_l sú jednoznačne určené riešením²⁵⁰ rovnice (24) pri okrajovej podmienke $\Phi_l(0) = 0$.

Dosadením do (22) máme pre asymptotiku $\psi(r)$ vyjadrenie

$$\psi(r) \rightarrow \frac{1}{r} \sum C_l \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l(r)\right) P_l(\cos \vartheta) \quad (27)$$

Zatiaľ sme ešte nevyužili to, že sa zaujímame iba o riešenia, ktoré majú asymptotiku (1.4). Táto ďalšia požiadavka už odstraňuje nejednoznačnosť riešenia úplne. Vyplýva z nej, že neznámu multiplikačnú konštantu riešenia treba voliť tak, aby konštanta C_l v asymptotickom vyjadrení (27) bola rovná

$$C_l = \frac{1}{k} e^{i\pi/2} e^{i\delta_l}$$

²⁵⁰ Vidno to aj z nasledujúceho argumentu. V oblasti $r \rightarrow 0$ máme dve nezávislé riešenia, jedno sa správa ako r^{l+1} , druhé ako r^{-l} . Podobne pre $r \rightarrow \infty$ máme dve nezávislé riešenia, $\cos(kr)$ a $\sin(kr)$. Ak pre $r \rightarrow 0$ vyberieme jednu z možností, fixujeme tým superpozíciu $\cos(kr)$ a $\sin(kr)$ pri veľkých r . Pripomíname ešte, že uvažujeme len reálne riešenia.

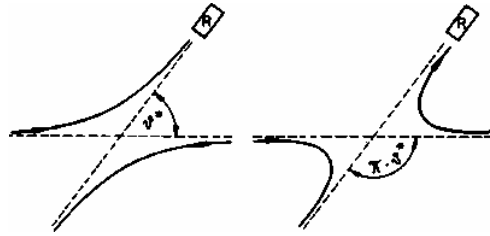
Po dosadení do (27) dostaneme priamo vyjadrenie (5), ktoré sme už predtým používali.

16.3 ROZPTYL IDENTICKÝCH ČASTÍC

Formalizmus z predchádzajúceho článku treba trochu modifikovať, ak sa zaoberáme rozptylom dvoch identických častíc. Korektný opis dostaneme pri dôslednom používaní sekundárneho kvantovania, tu sa ale obmedzíme na intuitívny výklad dôsledkov identičnosti častíc. Predstavme si najprv rozptyl dvoch bezspinových identických častíc, napríklad $\alpha + \alpha \rightarrow \alpha + \alpha$ alebo $\pi^+ + \pi^+ \rightarrow \pi^+ + \pi^+$. Predpokladajme, že poznáme potenciálnu energiu ich interakcie $V(r)$, a že sme, nerešpektujúc identitu častíc, našli už amplitúdu rozptylu $f(\vartheta^*)$. Prístroje registrujúce rozptýlené častice však nemôžu rozlíšiť medzi procesom, pri ktorom sa dopadajúca častica rozptýli pod uhlom ϑ^* a procesom, pri ktorom sa rozptýli pod uhlom $\pi - \vartheta^*$. Prítom rozptyl uvažujeme v sústave hmotného streda. Obidva procesy sú znázornené na obr. 16.2. Prvý z nich je opísaný amplitúdou $f(\vartheta^*)$, druhý amplitúdou $f(\pi - \vartheta^*)$. Obidva procesy sú koherentné, a preto výslednú amplitúdu, rešpektujúcu identitu častíc, dostaneme v tvare

$$F_S(\vartheta^*) = f(\vartheta^*) + f(\pi - \vartheta^*) \quad (1)$$

kde index S označuje uskutočnenú symetrizáciu. Vlnová funkcia dvojice identických častíc s nulovým spinom v konečnom stave musí byť symetrická voči ich výmene. Táto výmena však odpovedá v sústave hmotného streda zámene $r \leftrightarrow -r$, a to znamená $\vartheta^* \leftrightarrow \pi - \vartheta^*$. Odtiaľ dostávame znamienko + na pravej strane (1).



Obr. 16.2

Diferenciálny účinný prierez počítame podľa vzťahu

$$\frac{d\sigma_S}{d\Omega^*} = |F_S(\vartheta^*)|^2 = |f(\vartheta^*) + f(\pi - \vartheta^*)|^2 \quad (2)$$

a pri výpočte celkového účinného prierezu používame vzťah

$$\sigma = \frac{1}{2} \int \frac{d\sigma_S}{d\Omega^*} d\Omega^* = \frac{1}{2} \int |f(\vartheta^*) + f(\pi - \vartheta^*)|^2 d\Omega^* \quad (3)$$

Faktor 1/2 na pravej strane zabraňuje dvojnásobnému započítaniu jednotlivých príspevkov. Tým, že sme symetrizovali amplitúdu rozptylu a teda aj vlnovú funkciu koncového stavu, rešpektovali sme identitu častíc. Potom ale stav, ktorý dostaneme zámene oboch častíc, už nie je novým fyzikálnym stavom. Zámene častíc ale odpovedá zámene $\vartheta^* \rightarrow \pi - \vartheta^*$ v symetrizovanej amplitúde rozptylu $F_S(\vartheta^*)$. Vo vzťahu (3) by sme teda mali vypustiť faktor 1/2 a integrovať iba cez oblasť $0 \leq \vartheta^* \leq \pi/2$. Vzhľadom na symetriu $F_S(\vartheta^*)$ voči zámene $\vartheta^* \rightarrow \pi - \vartheta^*$ je to však to isté ako integrovať cez celý priestorový uhol a výsledok deliť dvomi tak, ako sme to urobili v (3).

Predchádzajúce vzorce platili pre rozptyl bozónov opísaných symetrickou vlnovou funkciou. Pre rozptyl fermiónov musíme zobrať do úvahy požiadavku antisymetričnosti vlnovej funkcie voči súčasnej zámene priestorových a spinových súradníc. Pre sústavu dvoch elektrónov máme napr. štyri možné vlnové funkcie

$$\begin{aligned} f_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\chi_{1,1} \\ f_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\chi_{1,0} \\ f_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\chi_{1,-1} \\ f_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\chi_{0,0} \end{aligned} \quad (4)$$

kde index A, resp. S označuje antisymetriu, resp. symetriu priestorovej vlnovej funkcie. Spinové vlnové funkcie χ_{s, s_z} sú symetrické pre $S = 1$ a pri $S = 0$ máme antisymetrickú vlnovú funkciu.

Ak sa dva elektróny nachádzajú v stave s antisymetrickou priestorovou vlnovou funkciou (tzv. *tripletný stav*), tak amplitúda rozptylu bude antisymetrická voči zámene $\vartheta^* \leftrightarrow \pi - \vartheta^*$ a pre diferenciálny účinný prierez dostaneme

$$\frac{d\sigma_A}{d\Omega^*} = |f(\vartheta^*) - f(\pi - \vartheta^*)|^2 = |F_A(\vartheta^*)|^2 \quad (5)$$

kde amplitúda rozptylu $f(\vartheta)$ je opäť počítaná bez rešpektovania identity častíc.

Ak pri rozptyle elektrónov výsledná vlnová funkcia zodpovedá stavu s celkovým spinom rovnajúcim sa nule (tzv. *singletný stav*), tak je priestorová časť vlnovej funkcie symetrická a diferenciálny účinný prierez je daný vzťahom

$$\frac{d\sigma_S}{d\Omega^*} = |f(\vartheta^*) + f(\pi - \vartheta^*)|^2 = |F_S(\vartheta^*)|^2 \quad (6)$$

Ak v experimente používame nepolarizovaný zväzok i terč a nemeríme ani priemety spinov v koncovom stave, potom zrejme počet prípadov, keď ide o rozptyl

v singletnom a tripletnom stave, je daný jednoduchou štatistikou a pozorovaný účinný prierez bude daný vzťahom

$$\frac{d\sigma}{d\Omega^*} = \frac{3}{4} |f(\vartheta^*) - f(\pi - \vartheta^*)|^2 + \frac{1}{4} |f(\vartheta^*) + f(\pi - \vartheta^*)|^2 \quad (7)$$

Faktory 3/4 a 1/4 odpovedajú tomu, že dvojelektrónová funkcia sa s pravdepodobnosťou 3/4 vyskytuje v tripletnom a s pravdepodobnosťou 1/4 v singletnom stave. Relatívnu váhu vidno z toho, že pri dvojelektrónových funkciách máme podľa (4) tri tripletné a jednu singletnú vlnovú funkciu.

Dôsledky symetrizácie vidno prakticky ihneď, ak za amplitúdu $f(\vartheta^*)$ zoberieme napríklad amplitúdu rozptylu pre Rutherfordov rozptyl, spočítame diferenciálne účinné prierezy (5), (6), (7) a porovnáme ich s výsledkom získaným bez rešpektovania identity častíc.

Poučný je tiež rozklad symetrickej a antisymetrickej amplitúdy $F_S(\vartheta^*)$ a $F_A(\vartheta^*)$ do parciálnych vln.

Obidve tieto aplikácie prenecháme čitateľovi.

16.4 ROZPTYL ELEKTRÓNU NA ATÓME

Začneme s rozptylom elektrónu na najjednoduchšom atóme – atóme vodíka. Budeme tiež predpokladať, že v hrubom priblížení možno zanedbať identity dopadajúceho elektrónu a elektrónu v atóme vodíka a že možno zanedbať všetky efekty spôsobené spinom elektrónov. Dopadajúci elektrón budeme nazývať elektrónom „1“ a elektrón v atóme vodíka bude mať číslo „2“. Našou úlohou je nájsť diferenciálny účinný prierez pre rozptyl elektrónu do priestorového uhla $d\Omega$ pri súčasnom prechode atómu zo základného stavu ψ_0 do určitého excitovaného stavu ψ_n .

Pri riešení úlohy používame nestacionárnu poruchovú metódu. Vlnová funkcia začiatočného stavu je

$$\psi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_1} \psi_0(\mathbf{r}_2) \quad (1)$$

a vlnová funkcia konečného stavu je

$$\psi_f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}_1} \psi_n(\mathbf{r}_2) \quad (2)$$

Vo vzťahoch (1) a (2) je V normalizačný objem, $\hbar\mathbf{k}$ je hybnosť dopadajúceho a $\hbar\mathbf{k}'$ rozptýleného elektrónu. Absolútne hodnoty k , k' sú viazané zákonom zachovania energie

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + E_0 = \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} + E_n \quad (3)$$

Podľa (1.9b) nestacionárna poruchová metóda pre pravdepodobnosť prechodu (za jednotku času) zo začiatočného stavu i do konečného stavu f dáva

$$W_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{fi}|^2 \rho(E_f) \quad (4)$$

kde

$$H'_{fi} = \int \psi_f^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) H' \psi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d^3 \mathbf{r}_1 d^3 \mathbf{r}_2$$

Porucha H' odpovedá interakcii dopadajúceho elektrónu s atómom vodíka

$$H' = -\frac{e'^2}{r_1} + \frac{e'^2}{r_{12}} \quad (5)$$

Prvý člen reprezentuje interakciu dopadajúceho elektrónu s jadrom atómu vodíka, druhý opisuje interakciu oboch elektrónov. Po dosadení do výrazu H'_{fi} a jednoduchých úpravách dostaneme

$$\begin{aligned} H'_{fi} &= \frac{1}{V} (-e'^2) \int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}_1} \frac{1}{r_1} d^3 \mathbf{r}_1 \int \psi_n^*(\mathbf{r}_2) \psi_0(\mathbf{r}_2) d^3 \mathbf{r}_2 + \\ &+ \frac{1}{V} (-e'^2) \int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}_1} d^3 \mathbf{r}_1 \int \psi_n^*(\mathbf{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \psi_0(\mathbf{r}_2) d^3 \mathbf{r}_2 \end{aligned}$$

Ak stav ψ_n je excitovaným stavom, funkcie ψ_n , ψ_0 sú ortogonálne a integrál cez \mathbf{r}_2 v prvom člene na pravej strane je nulový. Druhý integrál je veľmi príbuzný tým, ktoré sme už vyčíslili v kapitole 7 pri diskusii elektromagnetických formfaktorov. Namiesto premenných \mathbf{r}_1 , \mathbf{r}_2 použijeme premenné \mathbf{r}_2 , $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ a pomocou týchto premenných prepíšeme H'_{fi} do tvaru

$$H'_{fi} = \frac{e'^2}{V} \int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} \frac{1}{r} d^3 \mathbf{r} \int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}_2} \psi_n^*(\mathbf{r}_2) \psi_0(\mathbf{r}_2) d^3 \mathbf{r}_2 \quad (6)$$

S prvým z týchto integrálov sme sa už stretli pri skúmaní amplitúdy rozptylu (v prvom Bornovom priblížení) na Coulombovom potenciáli, druhý integrál je trochu príbuzný atómovým formfaktorom, ale líši sa od nich tým, že teraz pod integrálom vystupujú dve rôzne vlnové funkcie atómu vodíka. Zaveďme označenie

$$\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$$

ktoré ukazuje, že \mathbf{q} je hybnosť prenesená od dopadajúceho elektrónu na atóm vodíka. Ďalej položíme

$$F_{n0}(\mathbf{q}) = \int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}_2} \psi_n^*(\mathbf{r}_2) \psi_0(\mathbf{r}_2) d^3 \mathbf{r}_2 \quad (7)$$

Vyjadrenie pre H'_{fi} sa potom líši od Bornovej aproximácie pre rozptyl na Coulombovom potenciáli iba týmto faktorom a tým, že energia rozptýleného elektrónu nie je rovná energii dopadajúceho elektrónu, ale je daná vzťahom (3).

Teraz môžeme s výrazom H_{fi}^i daným rovnicou (6) urobiť všetko to, čo sme robili v kapitole 9 pri výpočte diferenciálneho účinného prierezu. Zmeny sú minimálne a uvedieme preto iba konečný výsledok

$$\frac{d\sigma_{n0}}{d\Omega} = |f_0(\mathbf{k}', \mathbf{k})F_{n0}(\mathbf{q})|^2 \cdot \frac{k}{k'} = \left(\frac{d\sigma(\mathbf{k}', \mathbf{k}')}{d\Omega} \right)_R \cdot |F_{n0}(\mathbf{q})|^2 \cdot \frac{k'}{k} \quad (8)$$

V tomto výraze diferenciálny účinný prierez s indexom R označuje Rutherfordovu formulu, $|F_{n0}(\mathbf{q})|^2$ je druhá mocnina nepružného formfaktora a ostatný faktor k'/k pochádza z integrovania cez konečné stavy elektrónu a z výrazu pre hustotu prúdu dopadajúceho elektrónu. Hustota prúdu sa totiž objaví pri prechode od pravdepodobnosti prechodu k diferenciálnemu účinnému prierezu.

Vzťah (8) udáva pravdepodobnosť rozptylu dopadajúceho elektrónu do priestorového uhlu $d\Omega$ pri súčasnej excitácii atómu do stavu n . Pri odvodení vzťahu (8) sme mali stále na mysli n -tú excitovanú hladinu z diskrétného spektra. Pri veľmi vysokých energiách dopadajúceho elektrónu sú ale možné prechody atómu vodíka do spojitého spektra. Situácia odpovedá tomu, že dopadajúci elektrón sa nielen rozptýli, ale aj vyrazí elektrón z atómu vodíka. Pri takýchto procesoch v experimente sa spravidla určuje iba energia a smer rozptýleného elektrónu a vzťah (8) je užitočné prepísať ako

$$\frac{d\sigma_{n0}}{dE'd\Omega} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_R \sum_n |F_{n0}(q)|^2 \cdot \frac{k'}{k} \delta \left(E' + E_n - E_0 - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) \quad (9)$$

Analóg výrazu násobiaceho $(d\sigma/d\Omega)_R$ na pravej strane sa dnes často používa vo fyzike elementárnych častíc a nazýva sa štruktúrnou funkciou. V tomto kontexte je zvlášť zaujímavá analýza rozptylu vysokoenergetických elektrónov na atómoch s viacerými elektrónmi. Táto analýza je podrobne prevedená v klasickej učebnici Landaua a Lifšica [9] a veľmi pekný prehľad modernej i klasickej literatúry experimentálnej i teoretickej je vo Westovom článku.²⁵¹

Podstatným výsledkom analýzy je to, že pri veľmi vysokých energiách hlavným príspevkom k (9) je nekoherentný rozptyl dopadajúcich elektrónov na jednotlivých elektrónoch atómu. Nekoherentnosť a vysoká energia vedú k tomu, že dopadajúci elektrón sa rozptyľuje na viacerých bodových časticách a nie na spojitom rozdelení náboja v atóme.

Na podrobnejšiu analýzu tejto aktuálnej a zaujímavej otázky však nemáme v úvodnej učebnici dost miesta.

²⁵¹ West, G. B.: Electron Scattering from Atoms, Nuclei and Nucleons. Physics Reports 18 (1975), s. 263-323.

16.5 OPIS ROZPTYLU POMOCOU PROPAGÁTORA

Doteraz sme sa zaoberali s problémom rozptylu v bezčasovom formalizme. Teraz si ukážeme, ako možno rozptyl častice na silovom centre opísať v časovom formalizme a nájsť príslušný poruchový rozvoj. Budeme pritom používať Greenovu funkciu časovej Schrödingerovej rovnice, nazývanú tiež *propagátorom*.

Pri rozptyle častice na potenciáli sa zaujímate o riešenie časovej SchR

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = H_0 \psi(\mathbf{r}, t) + H'(t) \psi(\mathbf{r}, t) \quad (1)$$

kde

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \quad (2)$$

a porucha $H'(t)$ zodpovedá potenciálnej energii „zapnutej“ v časovom intervale $-T/2 < t < T/2$

$$H'(t) = \begin{cases} 0 & -\infty < t < -T/2 \\ V(\mathbf{r}) & -T/2 < t < T/2 \\ 0 & T/2 < t \end{cases} \quad (3)$$

Rovnicu (1) je užitočné zapísať v tvare

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0 \right) \psi(\mathbf{r}, t) = H'(t) \psi(\mathbf{r}, t) \quad (4)$$

Pravú stranu v (4) môžeme označiť ako $f(\mathbf{r}, t)$ a prepísať (4) ešte raz

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0 \right) \psi(\mathbf{r}, t) = f(\mathbf{r}, t) \quad (5)$$

Rovnica (5) je nehomogénnou diferenciálnou rovnicou, pričom pravá strana hrá úlohu zdroja.

Riešenie rovnice (4), zodpovedajúce rozptylu častice na potenciáli, má mať z fyzikálnych dôvodov tvar

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \varphi_i(\mathbf{r}, t) + \Phi(\mathbf{r}, t) \quad (6)$$

kde

$$\varphi_i(\mathbf{r}, t) = C e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} e^{-i\omega t} \quad (7)$$

opisuje dopadajúcu rovinnú vlnu²⁵² a $\Phi(\mathbf{r}, t)$ zodpovedá rozptýlenej vlne. Štandardná metóda riešenia diferenciálnych rovníc s pravou stranou je metóda Greenových funkcií.

²⁵² Z hľadiska fyzikálnej interpretácie by bolo korektnšie opísať dopadajúcu vlnu vlnovým balíkom. Technicky je to ale zložitejšie a málo prehľadné. Ostaneme preto pri rovinnnej vlne. Vlnové balíky by sme dostali ako vhodné superpozície takýchto rovinných vln.

Greenovou *funkciou* rovnice (5) alebo *propagátorom* nazývame riešenie rovnice (5) príslušné k „zdroju“, ktorý je bodový v čase i v priestore. Je to teda riešenie rovnice

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0 \right) K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t') \quad (8)$$

kde H_0 pôsobí len na premennú \mathbf{r} .

Pomocou propagátora K_0 môžeme všeobecné riešenie nehomogénnej rovnice (5) zapísať v tvare

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \Phi_0(\mathbf{r}, t) + \int K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') f(\mathbf{r}', t') d^3 r' dt' \quad (9)$$

kde $\Phi_0(\mathbf{r}, t)$ je všeobecné riešenie homogénnej rovnice

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0 \right) \Phi_0(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (10)$$

O tom, že (9) je riešením (5) sa presvedčíme rýchlo priamym dosadením (9) do (5) a využitím (8).

Samotnou rovnicou (8) nie je K_0 určené jednoznačne; treba ešte špecifikovať príslušné okrajové podmienky. Môžeme sa to pokúsiť urobiť tak, aby potom už ľubovoľné riešenie $\psi(\mathbf{r}, t)$ integrálnej rovnice (9) (pri vhodne zvolenom $\Phi_0(\mathbf{r}, t)$ spĺňalo okrajové podmienky (6). Je zrejmé, že to bude vtedy, ak $K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')$ ako funkcia \mathbf{r}, t pri ľubovoľnom (fixovanom) \mathbf{r}', t' sa asymptoticky správa ako rozbiehavá vlna. Ako uvidíme v ďalšom, Greenovu funkciu s takýmto správaním dostaneme, ak žiadame splnenie podmienky príčinnosti

$$K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = 0 \quad \text{pre } t < t' \quad (11)$$

Zo zápisu (9) vidno fyzikálny význam okrajovej podmienky (11). Vlnová funkcia $\psi(\mathbf{r}, t)$ v čase t závisí podľa (11) len od zdrojov $f(\mathbf{r}', t')$ pre $t < t'$, a to je práve vyjadrením príčinného pôsobenia zdrojov.

V časovej SchR (4) hrá pravá strana úlohu zdroja $f(\mathbf{r}', t')$ a riešenie rovnice (4) môžeme preto zapísať v tvare (9), pričom namiesto $f(\mathbf{r}, t)$ píšeme $H'(t)\psi(\mathbf{r}, t)$. Dostaneme tak

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}, t) + \iint K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') H'(t') \psi(\mathbf{r}', t') d^3 r' dt' \equiv \varphi_t(\mathbf{r}, t) + \Phi(\mathbf{r}, t) \quad (12)$$

a význam $\varphi_t(\mathbf{r}, t)$ a $\Phi(\mathbf{r}, t)$ je daný rovnicami (6) a (7). Rovnica (12) je už zapísaná v tvare, ktorý umožňuje jej riešenie pomocou poruchového rozvoja. Postupovali by sme zas štandardným spôsobom: namiesto H' by sme napísali všade $\lambda H'$ a funkciu

$\psi(\mathbf{r}, t)$ by sme rozložili do mocnín λ , pričom nultým členom rozvoja by bola dopadajúca vlna $\varphi_i(\mathbf{r}, t)$. V prvom priblížení pre $\psi(\mathbf{r}, t)$ by sme takto dostali

$$\psi(\mathbf{r}, t) \approx \varphi_i(\mathbf{r}, t) + \iint K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') H'(t') \varphi_i(\mathbf{r}', t') d^3 r' dt' \quad (13)$$

Vzťah (13) nám už umožňuje nájsť amplitúdu rozptylu v najnižšom priblížení. Poruchu $H'(t)$ berieme v tvare (3) a vlnovú funkciu začiatočného stavu $\varphi_i(\mathbf{r}, t)$ pri normalizácii na konečný objem $V = L^3$ zvolíme takto

$$\varphi_i(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} e^{-i\omega_i t} \quad (14)$$

kde \mathbf{k}_i je vlnový vektor dopadajúcej častice a $\omega_i = \hbar \mathbf{k}_i^2 / 2m$. Porucha je zapnutá v časovom intervale $-T/2 < t' < T/2$ a zaujímame sa o to, s akou pravdepodobnosťou W_{fi} nájdeme pri $t > T/2$ časticu v stave opísanom vlnovou funkciou

$$\varphi_f(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{r}} e^{-i\omega_f t} \quad (15)$$

kde $\omega_f = \hbar \mathbf{k}_f^2 / 2m$. Amplitúdu tejto pravdepodobnosti označíme ako S_{fi} a podľa (13) pre ňu máme

$$S_{fi} = \int d^3 r \int d^3 r' \int_{-T/2}^{T/2} dt' \varphi_f^*(\mathbf{r}, t) K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') V(\mathbf{r}') \varphi_i(\mathbf{r}', t') \quad (16)$$

Teraz potrebujeme urobiť dve veci: najprv musíme vypočítať S_{fi} , a potom dať toto S_{fi} do súvisu s diferenciálnym účinným prierezom. Pre výpočet S_{fi} potrebujeme poznať vyjadrenie $K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')$.

Explicitné vyjadrenie pre K_0 je

$$K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = \frac{1}{i\hbar} \Theta(t - t') \sum_{\mathbf{k}} \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \varphi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}') e^{-i\omega_{\mathbf{k}}(t - t')} \quad (17)$$

Na pravej strane sčítujeme cez úplný ortonormovaný systém vlastných funkcií H_0 .

$$H_0 \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_{\mathbf{k}} \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$$

a funkcia $\Theta(t - t')$ je definovaná vzťahom

$$\Theta(t - t') = \begin{cases} 1 & \text{pre } t \geq t' \\ 0 & \text{pre } t < t' \end{cases}$$

Vzhľadom na prítomnosť $\Theta(t - t')$ spĺňa (17) podmienku (11). Priamym dosadením (17) do (8) a využitím

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \Theta(t - t') &= \delta(t - t') \\ \sum_{\mathbf{k}} \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \varphi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}') &= \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \end{aligned}$$

sa rýchlo presvedčíme o tom, že $K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')$ dané rovnicou (17) je riešením rovnice (8).

Pri $t > t'$ platí

$$\int d^3 \mathbf{r} \varphi_f^*(\mathbf{r}, t) K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = \frac{1}{i\hbar} \varphi_f^*(\mathbf{r}', t') \quad (18)$$

O správnosti tohto vzťahu sa presvedčíme priamym dosadením. Pri $t > t'$ podľa (17) s využitím (14) a (15) máme

$$\begin{aligned} \int d^3 \mathbf{r} \varphi_f^*(\mathbf{r}, t) K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') &= \frac{1}{i\hbar} \int d^3 \mathbf{r} \frac{1}{\sqrt{L^3}} \cdot \\ e^{-i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{r} + i\omega_f t} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - i\omega_{\mathbf{k}} t} \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}' + i\omega_{\mathbf{k}} t'} & \end{aligned} \quad (19)$$

Pretože

$$\int d^3 \mathbf{r} \frac{1}{L^3} e^{-i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{r}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = \delta_{\mathbf{k}_f, \mathbf{k}}$$

dostávame z (19)

$$\int d^3 \mathbf{r} \varphi_f^*(\mathbf{r}, t) K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = \frac{1}{i\hbar} \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{-i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{r}' + i\omega_f t'}$$

čo je práve (18). Poznamenajme, že čas t z výrazu (19) vypadol vďaka tomu, že v súčte cez \mathbf{k} ostalo len $\mathbf{k} = \mathbf{k}_f$, a preto $(\omega_f - \omega_{\mathbf{k}} = 0$.

Predchádzajúce odvodenie vzťahu (18) bolo trochu ťažkopádne. Ideu vidno jasnejšie zo zápisu stavov a operátorov v bezkoordinátnom formalizme. V ňom

$$\begin{aligned} \varphi_f(\mathbf{r}, t) &= \langle \mathbf{r} | \mathbf{k}_f, t \rangle = \langle \mathbf{r} | \mathbf{k}_f \rangle e^{-i\omega_f t} \\ \varphi_i(\mathbf{r}, t) &= \langle \mathbf{r} | \mathbf{k}_i, t \rangle = \langle \mathbf{r} | \mathbf{k}_i \rangle e^{-i\omega_i t} \\ K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') &= \frac{1}{i\hbar} \sum_{\mathbf{k}} \langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle e^{-i\omega_{\mathbf{k}}(t-t')} \langle \mathbf{k} | \mathbf{r}' \rangle \end{aligned}$$

Rovnica (18) v bezkoordinátnom formalizme je

$$e^{i\omega_f t} \langle \mathbf{k}_f | \left\{ \frac{1}{i\hbar} \sum_{\mathbf{k}} | \mathbf{k} \rangle e^{-i\omega_{\mathbf{k}}(t-t')} \langle \mathbf{k} | \right\} = e^{-i\omega_f t'} \langle \mathbf{k}_f |$$

a o správnosti tohto vzťahu sa presvedčíme okamžite, ak využijeme $\langle \mathbf{k}_f | \mathbf{k} \rangle = \delta_{\mathbf{k}_f, \mathbf{k}}$.

Po využití (18) zo vzťahu (17) máme

$$S_{fi} = \int d^3 r' \int_{-T/2}^{T/2} dt' \frac{1}{i\hbar} \varphi_f^*(r', t') V(r') \varphi_i(r', t') =$$

$$S_{fi} = \frac{1}{i\hbar} \frac{1}{L^3} \int d^3 r' e^{-ik_f \cdot r'} V(r') e^{ik_i \cdot r'} \int_{-T/2}^{T/2} dt' e^{-i(\omega_f - \omega_i)t'}$$

odkiaľ dostaneme

$$S_{fi} = \frac{1}{i\hbar L^3} V(\mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i) \frac{\sin[(\omega_f - \omega_i)T/2]}{(\omega_f - \omega_i)/2}$$

kde

$$V(\mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i) = \int e^{-ik_f \cdot r} V(r) e^{ik_i \cdot r} d^3 r \quad (21')$$

Pravdepodobnosť prechodu zo stavu i do stavu f za celú dobu interakcie je daná druhou mocninou absolútnej hodnoty S_{fi} ,

$$W_{fi} = |S_{fi}|^2 = \frac{1}{\hbar^2 L^6} |V(\mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i)|^2 \frac{\sin[(\omega_f - \omega_i)T/2]}{(\omega_f - \omega_i)/2} \cdot \frac{\sin[(\omega_f - \omega_i)T/2]}{(\omega_f - \omega_i)/2}$$

Pre veľké T platí

$$\frac{\sin[(\omega_f - \omega_i)T/2]}{(\omega_f - \omega_i)/2} \rightarrow 2\pi \delta(\omega_f - \omega_i)$$

Ak túto limitu urobíme v predposlednom člene v (22), potom posledný člen možno vyjadriť ako

$$\lim_{\Delta\omega \rightarrow 0} \frac{\sin[\Delta\omega T/2]}{\Delta\omega/2} \rightarrow T$$

a pre pravdepodobnosť prechodu za jednotku času dostávame

$$w_{fi} = \frac{W_{fi}}{T} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{L^6} |V(\mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i)|^2 \delta(E_f - E_i) \quad (23)$$

K tomuto vzťahu pre pravdepodobnosť prechodu za jednotku času sme sa ale už raz dostali v kapitole 9 pri vyčíslňovaní Bornovskej aproximácie pre rozptyl na statickom potenciáli a prešli sme od neho k známemu výrazu pre diferenciálny účinný prierez

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left| -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} V(\mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i) \right|^2$$

Odporúčame čitateľovi, aby si skúsil spočítať ďalšie priblíženie k diferenciálnemu účinnému prierezu. Postupujeme pritom tak, že zoberieme do úvahy ďalší člen na pravej strane (12) a príslušný element S_{fi} , prepíšeme do tvaru

$$S_{f_i} = -2\pi i \delta(E_f - E_i) V_{f_i} \frac{1}{L^3}$$

Pre diferenciálny účinný prierez, tým istým postupom ako vyššie, dostaneme

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left| -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} V_{f_i} \right|^2$$

Napokon, kvôli úplnosti, ešte naznačíme výpočet explicitného tvaru propagátora $K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')$. Vyjdeme z rovnice²⁵³ (17) a urobíme v nej substitúciu $\boldsymbol{\rho} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$, $\tau = t - t'$. Dostaneme tak

$$K_0(\boldsymbol{\rho}, \tau) = \frac{\Theta(\tau)}{i\hbar} \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \exp\left[i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\rho} - i \frac{\hbar k^2}{2m} \tau \right]$$

Exponent upravíme pomocou identity

$$\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\rho} - i \frac{\hbar k^2}{2m} \tau = -\frac{\hbar \tau}{2m} \left(\mathbf{k} - \frac{m}{\hbar \tau} \boldsymbol{\rho} \right)^2 + \frac{m \boldsymbol{\rho}^2}{2 \hbar \tau}$$

a po dosadení tohto do (24) prejdeme k novej integračnej premennej $\mathbf{q} = \mathbf{k} - (m/\hbar \tau)\boldsymbol{\rho}$. Dostaneme tak

$$K_0(\boldsymbol{\rho}, \tau) = \frac{\Theta(\tau)}{i\hbar} \exp\left[i \frac{m \boldsymbol{\rho}^2}{2 \hbar \tau} \right] \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3\mathbf{q} \exp\left[-i \frac{\hbar \tau}{2m} \mathbf{q}^2 \right]$$

V ostávajúcom integráli urobíme ešte v zložkách q_x, q_y, q_z triviálne substitúcie

$$q = \sqrt{\frac{2m}{\hbar}} x, \dots$$

a dostaneme

$$K_0(\boldsymbol{\rho}, \tau) = \frac{\Theta(\tau)}{i\hbar} \exp\left[i \frac{m \boldsymbol{\rho}^2}{2 \hbar \tau} \right] \left(\frac{1}{2\pi} \right)^3 \left(\frac{2m}{\hbar} \right)^{3/2} I^3$$

kde I je Fresnelov integrál

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ix^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{i}}$$

²⁵³ Od súčtu cez hodnoty \mathbf{k} povolené periodickou okrajovou podmienkou prejdeme v limite $L \rightarrow \infty$ k integrálu $(L^{-3} \sum_i \rightarrow (2\pi)^{-3} \int d^3\mathbf{k} \dots$

Konečný výsledok je

$$K_0(\boldsymbol{\rho}, \tau) = \frac{\Theta(\tau)}{i\hbar} \left(\frac{m}{2\pi\hbar\tau} \right)^{3/2} \exp \left[i \frac{m \boldsymbol{\rho}^2}{2 \hbar \tau} \right] \quad (25)$$

Fresnelove integrály možno nájsť v tabuľkách ako

$$\int_0^\infty \sin(x^2) dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{2}}, \quad \int_0^\infty \cos(x^2) dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{2}}$$

alebo si ich možno zrátať priamo. Najjednoduchšie je integrovať funkciu $\exp(z^2)$ po vhodnej kontúre v komplexnej rovine. Takouto kontúrou je napríklad táto: vyjdeme zo začiatku a ideme priamo nahor po imaginárnej osi až do bodu $(0, iR)$. Potom postupujeme 45 stupňov proti hodinovým ručičkám po obode kružnice s polomerom R a napokon sa vrátíme po priamke do začiatku. Takto vyjadříme Fresnelove integrály pomocou Laplaceovho, t. j. pomocou integrálu z $\exp(-x^2)$ od 0 po ∞ . Laplaceov integrál sa ráta najľahšie známym trikom: integrujeme $\exp(-x^2 - y^2)$ po celej rovine (x, y) raz v karteziánskych a raz v polárnych súradniciach. Porovnanie oboch výsledkov už vedie priamo k cieľu. Explicitné vyjadrenie pre propagátor takto je

$$K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = \frac{\Theta(t-t')}{i\hbar} \left[\frac{m}{2\pi i \hbar (t-t')} \right]^{3/2} \exp \left[i \frac{m |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2}{2 \hbar (t-t')} \right] \quad (26a)$$

a v špeciálnom prípade $r' = 0, t' = 0$ máme

$$K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{0}, 0) = \frac{\Theta(t)}{i\hbar} \left[\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right]^{3/2} \exp \left[i \frac{m r^2}{2 \hbar t} \right] \quad (26b)$$

Pozrime sa teraz bližšie na fyzikálny význam²⁵⁴ propagátora. V prípade (26b) propagátor určuje vlnovú funkciu spôsobenú zdrojom $\delta^3(\mathbf{r})\delta(t)$, pôsobiacim v začiatku súradnej sústavy za veľmi krátky časový úsek. Fourierovský rozklad $\delta^3(\mathbf{r})\delta(t)$ ukazuje, že v zdroji sú rovnomerne zastúpené všetky vlnové vektory a všetky frekvencie²⁵⁵.

Výraz $\exp[imr^2/(2\hbar t)]$ v (26b) opisuje rozbiehavú sférickú vlnu²⁵⁶ a pri veľkom r a veľkom t sa vlnová dĺžka tejto vlny len pomaly mení. Dĺžku vlny pri určitom

²⁵⁴ Feynman R. P. – Hibbs A. R.: Quantum mechanics and path integrals McGraw-Hill, New York, 1965, kap. 3, § 1.

²⁵⁵ Klasickým analógom takéhoto zdroja je výbuch, v ktorom na všetky strany vyletujú častice so všetkými možnými rýchlosťami.

²⁵⁶ Vlnoplocha s konštantnou fázou je daná vzťahom $mr^2/(2\hbar t) = \text{const}$ a s rastúcim t sa zrejme posúva k väčším hodnotám r , ide teda o rozbiehavú vlnu.

t a v určitej oblasti r nájdeme z podmienky

$$\frac{m(r + \lambda)^2}{2\hbar t} - \frac{mr^2}{2\hbar t} = 2\pi$$

pre $r \gg \lambda$ odtiaľ dostaneme

$$\lambda \approx \frac{2\pi\hbar}{m(r/t)}$$

V klasickej analógii odpovedá výrazu $m(r/t)$ hybnosť častice a pre λ máme

$$\lambda \approx \frac{2\pi\hbar}{p}$$

Exponent v (26b) nám teda hovorí, že z bodového zdroja prídu v čase t do oblasti s daným r častice s hybnosťou $p \approx m(r/t)$.

Vyššie členy poruchového radu (13) majú štruktúru, ktorú možno názorne fyzikálne interpretovať a znázorniť graficky pomocou Feynmanových diagramov²⁵⁷. Iteráciami (12) do druhého rádu dostávame

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}, t) \approx & \varphi_i(\mathbf{r}, t) + \int K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') H'(\mathbf{r}', t') \varphi_i(\mathbf{r}', t') d^3\mathbf{r}' dt' + \\ & + \iint K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}'', t'') H'(\mathbf{r}'', t'') K_0(\mathbf{r}'', t''; \mathbf{r}', t') H'(\mathbf{r}', t') \varphi_i(\mathbf{r}', t') d^3\mathbf{r}'' dt'' d^3\mathbf{r}' dt' \end{aligned} \quad (27)$$

Druhý člen v súčte (27) interpretujeme takto: dopadajúca vlna $\varphi_i(\mathbf{r}, t)$ sa v bode \mathbf{r}' v čase t' rozptýli na poruche $H'(\mathbf{r}', t')$ a potom sa zas šíri voľne z bodu (\mathbf{r}', t') do bodu (\mathbf{r}, t) . Tomuto voľnému šíreniu sa častice odpovedá propagátor $K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')$. Integrovanie cez \mathbf{r}', t' ukazuje, že výsledná amplitúda je superpozíciou amplitúd pochádzajúcich z rozptylu v rôznych bodoch \mathbf{r}' v rôznych časoch t' .

Tretí člen výrazu (27) odpovedá dvom „rozptylom“ na poruche. Medzi prvým a druhým rozptylom sa častica šíri voľne a po druhom rozptyle sa zas šíri voľne. Graficky je druhý a tretí člen znázornený na obr. 16.3, kde čiary označené ako φ_i sú priradené dopadajúcej vlně a čiary označené K_0 opisujú voľné šírenie sa častice. Lahko sa dá ukázať, že priradenie takýchto diagramov jednotlivým členom poruchového rozvoja je jedno-jednoznačné.

Propagátor K_0 vo vyjadrení (17) alebo v ekvivalentných vyjadreniach (24), (26) sme vyššie iba „uhádli“. Teraz, kvôli úplnosti, ešte uvedieme podrobnejší výpočet K_0 . Budeme hľadať riešenie rovnice

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0 \right) K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{0}, 0) = \delta^3(\mathbf{r}) \delta(t) \quad (28)$$

²⁵⁷ Feynmanove diagramy sú dnes asi najčastejšie používaným teoretickým nástrojom vo fyzike elementárnych častíc a v štatistickej fyzike.

a zovšeobecnenie na prípad $t' \neq 0$, $r' \neq 0$ prenecháme čitateľovi. Výraz $K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{0}, 0)$ možno zapísať ako Fourierov integrál s neznámymi koeficientmi

$$K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{0}, 0) = \int K(\mathbf{q}, \omega) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} e^{-i\omega t} \frac{d^3\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{d\omega}{2\pi} \quad (29a)$$

a δ -funkcie na pravej strane (28) môžeme vyjadriť známym spôsobom

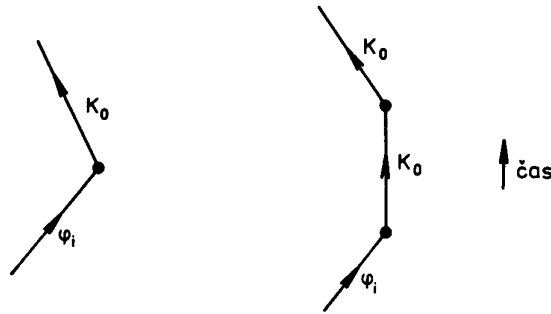
$$\delta^3(\mathbf{r})\delta(t) = \int e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} e^{-i\omega t} \frac{d^3\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{d\omega}{2\pi} \quad (29b)$$

pričom všetky integrály v (29) prebiehajú cez intervaly $(-\infty, \infty)$. Po dosadení (29a, b) do (28) a niekoľkých úpravách dostávame

$$K(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{\hbar \left(\omega - \frac{\hbar\mathbf{q}^2}{2m} \right)}$$

a odtiaľ

$$K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{0}, 0) = \frac{1}{\hbar} \iint \frac{1}{\hbar \left(\omega - \frac{\hbar\mathbf{q}^2}{2m} \right)} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} e^{-i\omega t} \frac{d^3\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{d\omega}{2\pi} \quad (30)$$



Obr. 16.3

Integrál cez ω ale nie je definovaný, lebo obsahuje singularitu pri $\omega = \hbar\mathbf{q}^2/2m$. Na druhej strane sme zatiaľ nevyužili okrajovú podmienku $K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{0}, 0) = 0$ pre $t < 0$. Podobne ako pri Greenových funkciách bezčasovej SchR, aj tu sa ukazuje, že spôsob obchádzania singularitu tesne súvisí s okrajovými podmienkami. Ak

obchádzanie singularít v (30) upravíme tak, že pól presunieme tesne pod reálnu os v premennej ω , máme

$$K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{0}, 0) = \frac{1}{\hbar} \int d^3 \mathbf{q} \int d\omega \frac{1}{\omega - \left(\frac{\hbar \mathbf{q}^2}{2m} - i\varepsilon \right)} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} e^{-i\omega t} \frac{d^3 \mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{d\omega}{2\pi}$$

a integrál už bude dobre definovaný. Pri $t > 0$ môžeme, vďaka faktoru $\exp(-i\omega t)$ uzavrieť integračnú kontúru veľkým polkruhom v dolnej polrovine komplexnej roviny ω a podľa vety o rezíduách vyjadriť integrál cez ω pomocou rezídua pólu v bode $\hbar \mathbf{q}^2 / 2m - i\varepsilon$. Dostaneme tak

$$K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{0}, 0) = \frac{1}{i\hbar} \int d^3 \mathbf{q} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} V(\mathbf{r}) e^{-i\hbar \mathbf{q}^2 t / 2m}, \quad t > 0$$

Pre $t < 0$ musíme integračnú kontúru uzavrieť veľkým polkruhom v hornej polrovine ω a vzhľadom na to, že v hornej polrovine niet singularít, bude pre záporné hodnoty t propagátor $K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{0}, 0)$ identicky rovný nule. Takto dostávame faktor $\Theta(t)$ a prichádzame priamo k (24).

S propagátorom sme sa stretli pri riešení nehomogénnej Schrödingerovej rovnice (5). Ukazuje sa však, že veľmi príbuzná funkcia sa objaví aj pri riešení Cauchyho úlohy pre homogénnu SchR. Úloha je formulovaná takto: pri $t > t'$ hľadáme riešenie SchR

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) - H_0 \psi(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (31a)$$

spĺňajúce v čase t' začiatočnú podmienku

$$\psi(\mathbf{r}, t)|_{t'} = \Phi(\mathbf{r}) \quad (31b)$$

Úplný ortonormovaný systém vlastných funkcií H_0 označíme ako $\{\varphi_k(\mathbf{r})\}$ a príslušné vlastné hodnoty budú E_k . Funkciu $\Phi(\mathbf{r})$ môžeme rozložiť do radu

$$\Phi(\mathbf{r}) = \sum_k C_k \varphi_k(\mathbf{r}) \quad (32)$$

Riešením (31a) spĺňajúcim (31b) je zrejme vlnová funkcia

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_k C_k e^{-iE_k(t-t')/\hbar} \varphi_k(\mathbf{r})$$

kde koeficienty $\{C_k\}$ nezávisia od času. Pre $t > t'$ môžeme s využitím (17) zapísať

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}, t) &= i\hbar \int K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') \Phi(\mathbf{r}') d^3 \mathbf{r}' = \\ &= i\hbar \int K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') \psi(\mathbf{r}', t') d^3 \mathbf{r}' \end{aligned} \quad (34)$$

kde integrujeme cez \mathbf{r}' ale nie cez t' .

Vzťah (34) je formálnym vyjadrením Huygensovho princípu pre Schrödinge–rovu rovnicu. Vlnovú funkciu v čase t dostaneme tak, že vlnovú funkciu v čase t' považujeme za „hustotu zdrojov“.

O správnosti (34) sa presvedčíme okamžite, ak (17) dosadíme do (34) a využijeme ortonormovanosť systému $\{\varphi_k\}$. Pre opis časového vývoja systému sa však častejšie používa operátor

$$U(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = \sum_k \varphi_k(\mathbf{r}) \varphi_k^*(\mathbf{r}') e^{-iE_k(t-t')/\hbar} \quad (35)$$

Pre $t > t'$ platí podľa predchádzajúceho

$$U(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = i\hbar K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')$$

Vzhľadom na to, že U neobsahuje $\Theta(t-t')$, je riešením homogénnej SchR

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0 \right) U(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = 0$$

V rovnici (35) sme U zapísali v súradnicovej reprezentácii. Jeho všeobecný zápis je

$$U(t, t') = \sum_k |\varphi_k\rangle e^{-iE_k(t-t')/\hbar} \langle \varphi_k| = e^{-iH_0(t-t')/\hbar}$$

a všeobecný zápis propagátora je

$$K_0(t, t') = \frac{\Theta(t-t')}{i\hbar} e^{-iH_0(t-t')/\hbar}$$

16.6 ZHRNUTIE

Bez podrobnejšieho komentára zopakujeme prehľadne základné vzťahy.

Riešenie bezčasovej SchR, zodpovedajúce problému potenciálového rozptylu má pri $r \rightarrow \infty$ tvar

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

$f(\vartheta, \varphi)$ je amplitúda rozptylu, ktorá súvisí s diferenciálnym účinným prierezom podľa vzťahu

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

V Bornovej aproximácii platí

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

kde \mathbf{k} je vlnový vektor dopadajúcej a \mathbf{k}' vlnový vektor rozptýlenej častice.

Rozklad do parciálnych vln (sféricky symetrický potenciál):

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

δ_l je fázový posun v l -tej parciálnej vlne. Totálny účinný prierez:

$$\sigma_0 = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l$$

Optická teoréma

$$\text{Im } f(\vartheta=0) = \frac{k}{4\pi} \sigma_0$$

16.7 PRÍKLADY A PROBLÉMY

1. Nájdite fázové posuny pre rozptyl častice na „tvrdej guli“ reprezentovanej potenciálom

$$V(r) = \infty \quad \text{pre } r < a$$

$$V(r) = 0 \quad \text{pre } r \geq a$$

Návod: Riešenie radiálnej SchR pre dané l musí v tejto situácii spĺňať podmienku $R_l(a) = 0$. Pre $r > a$ je riešenie dané superpozíciou sférickej Besselovej a Neumannovej funkcie

$$R_l(a) = A_l j_l(ka) + B_l n_l(ka)$$

Podmienka $R_l(a) = 0$ určuje podiel koeficientov A_l, B_l . Potom sa už ľahko určia fázové posuny.

2. Preskúmajte rozptyl častice na „tvrdej guli“ s polomerom a v limitnom prípade, keď vlnová dĺžka častice je oveľa väčšia ako rozmer gule: $k \ll 1/a$. Nájdite správanie sa fázových posunov v tomto limitnom prípade.

3. Nájdite fázové posuny pre rozptyl častice na potenciálovej jame

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

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

Návod: Postup riešenia je analogický k prvému príkladu. Radiálna SchR pre danú parciálnu vlnu vnútri jamy má riešenie (regulárne v okolí $r = 0$) $j_l(\kappa r)$, kde κ je dané podmienkou

$$\frac{\hbar^2}{2m} \kappa^2 = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 + V_0$$

Ak toto „zošijeme“ so všeobecným riešením mimo jamy, dostaneme rýchlo fázové posuny. Všimnite si opäť „prahové správanie“ fázových posunov, t. j. limitu $k \rightarrow 0$ (fyzikálne je to limita vlnových dĺžok λ podstatne väčších ako rozmery jamy).

4. Predpokladajte, že rozptyl dvoch bezspinových častíc prebieha v s -vlne. Nájdite pri danej energii dopadajúcej častice uhlové rozloženie rozptýlených častíc v laboratórnej sústave.
5. Uvažujte rozptyl dvoch bezspinových častíc pri energii, ktorá je taká nízka, že fázové posuny sú rôzne od nuly iba v parciálnych vlnách $l = 0, l = 1$. Nájdite uhlové rozloženie diferenciálneho účinného prierezu pomocou fázových posunov $\delta_0(k), \delta_1(k)$ a všimnite si, či by bolo možné určiť fázové posuny z experimentálnych údajov o rozptyle. Nájdite hodnotu uhla rozptylu $\vartheta = \vartheta_0$, pri ktorej je diferenciálny účinný prierez minimálny. Prediskutujte podobne aj situácie, keď sú fázové posuny nenulové v parciálnych vlnách s $l = 0, 1, 2$.
6. Pomalý neutrón sa rozptyľuje na jadre nachádzajúcom sa v bode \mathbf{r}_0 . Nájdite vlnovú funkciu neutrónu po rozptyle za predpokladu, že rozptyl prebieha len v s -vlne a fázový posun možno aproximovať vzťahom $\delta(k) = ak$.
7. Pomalé neutróny sa rozptyľujú na jadrách v pravidelnom kryštálovom usporiadaní. Polohy jadier sú

$$\mathbf{r}_n = n_1 \mathbf{d}_1 + n_2 \mathbf{d}_2 + n_3 \mathbf{d}_3$$

kde n_i sú celé čísla a \mathbf{d}_i sú základné vektory mriežky. Nájdite amplitúdu rozptylu neutrónu na kryštále za predpokladu, že rozptyl prebieha iba v s -vlne a možno použiť priblíženie $\delta(k) = ak$.

8. Nájdite amplitúdu rozptylu a diferenciálny účinný prierez rozptylu dvoch α -častíc pri rešpektovaní ich identičností. Amplitúdu rozptylu pre neidentické častice opíšte Rutherfordovou formulou. Rozložte amplitúdu rozptylu do parciálnych vln a prediskutujte, prečo sú amplitúdy niektorých parciálnych vln nulové.
9. Nájdite amplitúdu rozptylu a diferenciálny účinný prierez pre rozptyl dvoch elektrónov pri rešpektovaní identičnosti častíc. Uvažujte
 - a) rozptyl v stave s celkovým spinom rovným jednej,
 - b) rozptyl v stave s celkovým spinom nulovým.
 Ako amplitúdu rozptylu bez rešpektovania identičnosti častíc berte Rutherfordovu formulu a v oboch prípadoch a), b) urobte rozklad amplitúdy rozptylu do parciálnych vln. Napokon
 - c) nájdite diferenciálny účinný prierez pre rozptyl nepolarizovaných elektrónov.
10. Určte v Bornovej aproximácii diferenciálny a celkový účinný prierez pre nepružný rozptyl elektrónu na atóme vodíka. Využite výsledky článku 16.4 a spočítajte explicitne prípad, keď sa atóm vodíka excituje pri rozptyle zo stavu $1s$ do stavu $2s$.