4. Sklaida sferiškai simetrišku potencialu. Skeidimas dalinėmis bangomis

Lygtys radialiosioms banginėms funkcijoms

Potencialai, kuriems būdinga sferinė simetrija, yra labiausiai paplitę mikropasaulyje. Nagrinėsime, kaip sprendžiamas sklaidos uždavinys sferiškai simetriškiems potencialams. Sferiškai simetriniame lauke išlieka pastovus dalelės orbitinis judėjimo kiekio momentas **pr**=m**vr**. Jeigu dalelės banginė funkciją išskleisime dalinių bangų, kurios aprašomos tikrinėmis fiksuoto orbitinio judėjimo kiekio momento funkcijomis, tiesiniu dariniu (superpozicija), tai kiekviena dalinė banga jėgos centro išsklaidoma nepriklausomai nuo kitų dalinių bangų. Todėl sklaidos uždavinio sprendimas pasidaro paprastesnis, nes, sprendžiant lygtis kiekvienai dalinei bangai atskirai, banginės funkcijos kintamieji atsiskiria, o trimatė lygtis pavirsta trimis diferencialinėmis ar integralinėmis lygtimis.

Fizikiniu požiūriu atsiranda naujas aspektas. Būtent, kyla klausimas, kaip tarpusavyje interferuoja dalinės bangos, kai jos patenka į detektorių. Į šį klausimą atsakysime, kai išspręsime uždavinį ir surasime sprendinio asimptotiką. Tuomet pamatysime, kad toli nuo sklaidos centro kiekvienos dalinės bangos indėlis į sklaidos amplitudę, tuo pačiu ir į diferencialinį bei pilnutinį skerspjūvius, yra vienas realus parametras, vadinamas **sklaidos faze**. Sklaidos fazių didumą ir priklausomybę nuo dalelės energijos sąlygoja sklaidos potencialas $V(\mathbf{r})$.

Dabar galime imtis nuoseklaus dalinių bangų metodo nagrinėjimo.

Prisitaikant prie potencialo simetrijos, bus naudojama sferinė koordinačių sistema. Iš simetrijos seka, kad sklaidos sferiškai simetriniu potencialu atveju sklaidos amplitudė $f(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ priklauso tiktai nuo perduotojo judėjimo kiekio modulio $k = |\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'|$, t.y. nuo dalelės energijos, ir nuo sklaidos kampo θ_r, kuris lygus kampui tarp $\mathbf{k}$ ir $\mathbf{k}$' vektorių.

Sklaidos uždavinio funkcija dabar tenkina lygtį:

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{kr}} + \int G_0^{(+)}(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}')\, V(r')\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}')d^3r', \tag{1}$$

kurioje vietoje $V(\mathbf{r}')$ stovi $V(r')$. Todėl (1) funkcija dabar irgi priklauso tiktai nuo r ir kampo θ_r. Ji nepriklauso nuo azimutinio kampo ϕ. Patogu (1) funkciją vietoje sferinių funkcijų skleisti Ležandro polinomų eilute:

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} R_l(r) P_l(\cos\theta_r). \tag{2}$$

Funkcijas $R_l(r)$ vadinsime sklaidos uždavinio radialiosiomis funkijomis. Jos tenkina tą pačią iš kvantinės mechanikos gerai žinomą (Bandzaitis ir Grabauskas, 119p.) Šredingerio lygtį surištų būsenų radialiosioms funkcijoms:

$$\frac{d^2(rR_l)}{dr^2} - \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} - V(r)\right](rR_l) = 0. \tag{3}$$

Žinant, kad sklaidos uždavinys sprendžiamas atsižvelgiant į daugiau papildomų sąlygų nei surištų būsenų uždavinys, būtų tikslinga surasti ir integralinę lygtį, kurios sprendinys būtų atitinkanti (1) radialioji funkcija $R_l(r)$. Tam tikslui įrašome (2) į (1) ir plokščią bangą taip pat išskleidžiame dalinėmis bangomis:

$$e^{i\mathbf{kr}} = \sum_l i^l(2l+1)j_l(kr)P_l(\cos\theta_r), \tag{4}$$

kur $j_l(kr)$ – sferinė Beselio funkcija. Šios lygties kairę ir dešinę puses dauginame iš $P_{l'}(\cos\theta)$, panaudojame Ležandro polinomų ortonormavimo sąlygą (Bandzaitis ir Grabauskas, 306p.,(P.26))

$$\int_0^\pi P_l(\cos\theta_r)P_{l'}(\cos\theta_r)d\Omega_r = \delta_{ll'}\frac{2}{2l+1} \tag{5}$$

ir gauname šitokią išraišką:

$$R_l(r) = i^l(2l+1)j_l(kr) + \frac{2l+1}{4\pi}\sum_{l,l'=0}^{\infty}\int_0^\pi d\Omega_r d\Omega_{r'} P_l(\cos\theta_r)$$

$$\times G_0^{(+)}(E,\mathbf{r},\mathbf{r'})P_{l'}(\cos\theta_{r'})V(r')R_{l'}(r')r'^2 dr'. \tag{6}$$

Gryno funkcijai iš antrosios paskaitos (2.35)

$$G_0^{(+)}(E,\mathbf{r},\mathbf{r'}) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r'})}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r'}|}$$

pritaikysime specialiųjų funkcijų teorijoje gerai žinomą skleidinį:

$$\frac{e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r'})}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r'}|} = \frac{i\pi}{2\sqrt{rr'}}\sum_{\lambda=0}^{\infty}(2\lambda+1)J_{\lambda+1/2}(kr_<)H^{(1)}_{\lambda+1/2}(kr_>)P_\lambda(\hat{\mathbf{n}}\cdot\hat{\mathbf{n}}')$$

$$= ik\sum_\lambda(2\lambda+1)j_\lambda(kr_<)h^{(1)}_\lambda(kr_>)P_\lambda(\hat{\mathbf{n}}\cdot\hat{\mathbf{n}}')$$

$$= -k\sum_\lambda(2\lambda+1)j_\lambda(kr_<)[h^{(1)}_\lambda(kr_>) - ij_\lambda(kr_>)]P_\lambda(\hat{\mathbf{n}}\cdot\hat{\mathbf{n}}'). \tag{7}$$

Čia $r_<$ ir $r_>$ – mažesnioji ir didesnioji r ir r' vertės, $\hat{\mathbf{n}}$ ir $\hat{\mathbf{n}}'$ – $\mathbf{r}$ ir $\mathbf{r}$' krypčių vienetiniai vektoriai, $h^{(1)}_\lambda$ – sferinė Neimano funkcija. Įrašę (7) į (6) ir pritaikę

$$P_\lambda(\hat{\mathbf{n}}\cdot\hat{\mathbf{n}}') = \frac{4\pi}{2\lambda+1}\sum_\mu Y^*_{\lambda\mu}(\hat{\mathbf{n}})Y_{\lambda\mu}(\hat{\mathbf{n}}'), \tag{8}$$

$$P_\lambda(\cos\theta) = \left[\frac{4\pi}{2\lambda+1}\right]^{1/2} Y_{\lambda 0}(\theta,0) \tag{9}$$

formules, gauname integralinės lygties radialiajai funkcijai galutinę išraišką:

$$R_l(r) = i(2l+1)j_l(kr) + \int_0^\infty G_{0,l}^{(+)}(E,r,r')V(r')R_l(r')r'^2 dr', \tag{10}$$

kur

$$G_{0,l}^{(+)}(E,r,r') = \frac{2\mu k}{\hbar^2} j_l(kr_<)[h_l^{(1)}(kr_>) - ij_l(kr_>)] \tag{11}$$

yra laisvosios dalelės l-osios dalinės bangos Gryno funkcija.

Norint surasti dalinės bangos sklaidos amplitudę, reikia surasti $R_l(r)$ asimptotinę išraišką, kai $r \to \infty$. Iš (10) ir (11) formulių matyti, kad yra reikalingos sferinių Beselio ir Neimano funkcijų asimptotikos išraiškos:

$$j_l(x)\Big|_{x\to\infty} = \frac{\sin(x - l\pi/2)}{x}, \tag{12}$$

$$h_l(x)\Big|_{x\to\infty} = -\frac{\cos(x - l\pi/2)}{x}, \tag{13}$$

kurias perrašėme iš specialųjų funkcijų žinyno. Įrašome (12) ir (13) formules į (11), apsiribojame baigtinio veikimo spindulio potencialu ($r' = r_<$, $r = r_> \to \infty$) ir gauname galutinę išrašką:

$$R_l(r)\Big|_{r\to\infty} = i^l(2l+1)\frac{\sin(kr - l\pi/2)}{kr} - \frac{2\mu}{\hbar^2}(-i)^l \frac{e^{ikr}}{r}\int_0^\infty j_l(kr')V(r')R_l(r')r'^2 dr'. \tag{14}$$

Dabar galima pažymėti

$$f_l(k) = -(-i)^l \int_0^\infty j_l(kr')V(r')R_l(r')r'^2 dr' \tag{15}$$

ir (14) perrašyti šitaip:

$$R_l(r)\Big|_{r\to\infty} = i^l(2l+1)\frac{\sin(kr - l\pi/2)}{kr} + f_l(k)\frac{e^{ikr}}{r} \tag{16}$$

Belieka (16) įrašyti į (2) ir panaudojus (4) surasti dar vieną išraišką:

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})\Big|_{\mathbf{r}\to\infty} = e^{i\mathbf{kr}} + \sum_{l=0}^{\infty} f_l\, P_l(\cos\theta_r)\frac{e^{ikr}}{r}. \tag{17}$$

Sulyginę (17) su antrosios paskaitos

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})|_{r\to\infty} = e^{i\mathbf{kr}} + f(\mathbf{k}',\mathbf{k})\frac{e^{i\mathbf{kr}}}{\mathbf{r}},$$

matome, kad amplitudėje

$$f(\mathbf{k},\mathbf{k}') = \sum_{l=0}^{\infty} f_l\, P_l(\cos\theta_r) \tag{18}$$

yra amplitudės skleidinio Ležandro polinomais koeficientai f_l, vadinami **dalinėmis sklaidos amplitudėmis**.

Sklaidos fazės

Sklaidos fazei surasti patogesnė asimptotinė išraiška (16), užrašyta sueinančios ir išeinančios sferinių bangų pavidalu ($\sin z = (1/2i)[\exp(iz) - \exp(-iz)]$:

$$R_l(r)\Big|_{r\to\infty} = \frac{i^l(2l+1)}{2ik}\left\{\frac{e^{i(kr-l\pi/2)}}{r} - \frac{e^{-i(kr-l\pi/2)}}{r} + \frac{2ik}{i^l(2l+1)}f_l\frac{e^{ikr}}{r}\right\}$$
$$= -\frac{i^l(2l+1)}{2ik}\left\{\frac{e^{-i(kr-l\pi/2)}}{r} - \left[1+\frac{2ik}{2l+1}f_l\right]\frac{e^{i(kr-l\pi/2)}}{r}\right\}. \tag{19}$$

Kai potencialas, kuriame juda dalelė, yra realus dydis, dalelių skaičius yra pastovus, t.y. nesikeičia. Tai reiškia, kad dideliame atstume nuo jėgos centro ($r \gg d$) dalelių, sueinančių į centrą ir išeinančių iš jo, intensyvumai tarpusavyje lygūs. Iš šios sąlygos seka, kad koeficientas prieš išeinančią sferinę bangą yra lygus vienetui:

$$\left|1+\frac{2ik}{2l+1}f_l\right| = 1. \tag{20}$$

Ši sąlyga mums leidžia vietoje kiekvienos dalinės sklaidos amplitudės, kuri yra kompleksinis dydis, įvesti realią funkciją, kuri vadinama **sklaidos faze**:

$$1+\frac{2ik}{2l+1}f_l(k) = e^{2i\delta_l(k)} = S_l. \tag{21}$$

S_l vadinama sklaidos S matrica. Kadangi (20) formulėje yar absoliutinis didumas, todėl, atsisakius absoliutinio didumo, reikia įvesti fazinį daugiklį. Iš (21) surandame dalinę sklaidos amplitudę:

$$f_l(k) = \frac{2l+1}{2ik}(e^{2i\delta_l}-1) = \frac{2l+1}{k}e^{i\delta_l}\sin\delta_l. \tag{22}$$

Kiekvienai energijos (judėjimo kiekio) vertei sklaidos fazė δ_l pilnai apibrėžia radialiosios funkcijos $R_l(r)$, aprašančios dalinę bangą, asimptotiką. Įrašome (21) į (19) ir surandame asimptotikos išraišką:

$$R_l(r)\Big|_{r\to\infty} = \frac{i^l(2l+1)}{k}e^{i\delta_l}\frac{\sin(kr-l\pi/2+\delta_l)}{r}. \tag{23}$$

Kai $V \to 0$, visos dalinės sklaidos amplitudės f_l, o tuo pačiu ir visos sklaidos fazės taip pat pavirsta nuliais. Tuomet (23) asimptotikos išraiška pereina į laisvos dalelės dalinės bangos asimptotiką:

$$R_l^{laisv}(r)\Big|_{r\to\infty} = i(2l+1)j_l(kr)\Big|_{r\to\infty} = \frac{i^l(2l+1)}{k}\frac{\sin(kr-l\pi/2)}{r}. \tag{24}$$

Palyginus (23) ir (24) išraiškas matyti, kad jos skiriasi fazės priedu δ_l sinuso argumente, kas leidžia geriau suprasti, kodėl δ_l vadinama sklaidos faze.

Žinant sąryšį tarp dalinės amplitudės (iš (18) ir (22) formulių) ir dalinės sklaidos fazės, galima užrašyti sklaidos amplitudės, diferencialinio ir pilnutinio skerspjūvių išraiškas su sklaidos fazėmis:

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} f_l P_l(\cos\theta) = \frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(e^{2i\delta_l}-1)P_l(\cos\theta), \tag{25}$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 = \sum_{l,l'=0}^{\infty} f_l f_{l'}^* P_l(\cos\theta)P_{l'}(\cos\theta), \tag{26}$$

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l. \tag{27}$$

(27) formulė gauta pasinaudojant Ležandro polinomų ortonormavimo sąlyga (5). Iš (26) formulės matyti, kad išsklaidytų dalelių kampinis pasiskirstymas priklauso nuo skirtingų orbitinio judėjimo kiekio momento dalinių bangų interferencijos. Tuo tarpu pilnutinis sklaidos skerspjūvis nepriklauso nuo interferencijos, nes, suintegravus visų dalelės išlėkimo kampų atžvilgiu, interferencija pranyksta. Iš (27) matyti, kad pilnutinis sklaidos skerspjūvis negali būti didesnis už $(4\pi/k^2)\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)$, o dalinis pilnutinis sklaidos skerspjūvis $\sigma_l \leq 4\pi(2l+1)/k^2$.

Sulyginus (25) ir (27) išraiškas $\theta = 0$ atveju, galima pastebėti įdomų sąryšį tarp sklaidos amplitudės pirmyn menamosios dalies ir pilnutinio sklaidos skerspjūvio σ:

$$Im\ f(0) = \frac{k}{4\pi}\sigma, \tag{28}$$

nes $P_l(0) = 1$, o σ nuo kampo θ nepriklauso.

(28) sąryšis vadinamas **optine teorema** ir yra labai svarbus. Jis galioja bet kokiam potencialui ir nepriklauso nuo artinio, todėl yra naudojamas įvertinant rezultatų, gautų apytiksliais sklaidos teorijos metodais, tikslumą.

Sklaidos fazių priklausomybė nuo energijos mažų energijų srityje

Dažnai būna naudinga žinoti sklaidos fazės priklausomybę nuo energijos. Kai sklaidomos dalelės judėjimo kiekis (energija) mažas ($kd \ll 1$), sklaidos fazės priklausomybei nuo energijos būdingas universalus pobūdis. Šiai priklausomybei surasti sulyginsime (15) ir (22) formulių dešines puses

$$e^{i\delta_l}\sin\delta_l = -(-i)^l \frac{k}{2l+1}\int_0^{\infty} j_l(kr)\left[\frac{2\mu}{\hbar^2}V(r)\right]R_l(r)r^2 dr. \tag{29}$$

Panagrinėkime (29) išraiškos dešinę pusę sklaidos potencialo daliai srityje $r < d$. Joje yra sferinė Beselio funkcija. Mažoms kr vertėms žinomos šitokios Beselio ir Neimano funkcijų išraiškos:

$$j_l(x)\Big|_{x\to 0} \approx \frac{x^l}{(2l+1)!!}, \tag{30}$$

$$h_l(x)\Big|_{x\to 0} \approx -\frac{(2l+1)!!}{x^{l+1}}. \tag{31}$$

Jas panaudoję Gryno funkcijos išraiškoje (11) gauname:

$$G_{0,l}^{(+)}(E,r,r')\Big|_{k\to 0} = -\frac{2\mu}{\hbar^2}\frac{1}{2l+1}\frac{r_<^l}{r_>^{l+1}}. \tag{32}$$

Kai $k \to 0$, iš (10) matyti, kad $R_l(r) \sim k^l$, nes $j_l(kr) \sim k^l$. Įrašę šią priklausomybę į (29), gauname, kad

$$\delta_l\Big|_{k\to 0}(k) \sim k^{2l+1} \sim E^{l+1/2}. \tag{33}$$

Ši sklaidos fazės priklausomybė nuo energijos, kai $k \to 0$, yra universali ir tinka visiems baigtinio veikimo spindulio potencialams.

Sklaidos fazių skaičiavimo metodai

Sklaidos fazę tiksliai galima surasti tiktai atskiriems dirbtinai sugalvotiems potencialams. Praktiškai naudojamiems potencialams sklaidos fazė apskaičiuojama apytikslai. Yra keletas būdų sklaidos fazei apskaičiuoti:

1) sprendžiant radialiąją Šredingerio lygtį;

2) taikant perturbacijų teorijos metodus;

3) taikant fazinių funkcijų metodą.

Plačiausiai naudojami du pirmieji metodai.

Radialiosios Šredingerio lygties sprendimo metodas.

Įveskime pažymėjimą

$$u_l(r) = rR_l(r) \tag{34}$$

ir (3) lygtį perrašykime šitaip:

$$\frac{d^2u_l}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} - V(r)\right]u_l = 0. \tag{35}$$

Šios lygties sprendinys mažoms r reikšmėms elgiasi šitaip:

$$u_l(r)\Big|_{r\to 0} \sim r^{l+1}. \tag{36}$$

Didelėms r reikšmėms $u(r)$ asimptotikos išraišką surandame iš (23) formulės:

$$u_l(r)\Big|_{r\to\infty} \sim \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right). \tag{37}$$

Paprastai (35) lygtis integruojama skaitmeniškai. Funkcijos $u(r)$ pirmieji du taškai apskaičiuojami pagal (34) formulę. Skaičiavimo detalių nenagrinėsime. Svarbu žinoti, kad, integruojant (35) lygtį, funkcija surandama visoje srityje nuo 0 iki asimptotikos (37), atsižvelgiant į funkcijos $u(r)$ ir jos išvestinės $u'(r)$ tolydumo sąlygą visoje $0 < r < \infty$ srityje.

Kai potencialo veikimo spindulys baigtinis ($r < d$), uždavinyje yra du atstumo matavimo masteliai: diametras d ir dalelės De Broilio bangos ilgis $\lambda = 1/k$. (37) sąlyga galioja, jeigu patenkinamos dvi nelygybės: $kr \gg 1$ ir $r > d$. Jeigu fiksuotai dalelės energijai E potencialo veikimo atstumas d toks, jog sąlyga $kd \gg 1$ nepatenkinama, tai funkcija $u(r)$ asimptotiką (37) pasiekia toli už potencialo veikimo ribų. Šiuo atveju netikslinga (35) integruoti tol, kol bus pasiekta asimptotika, t.y. $r \gg 1$, nes, jau esant $r > d$, dalelė juda laisvai, ir (3) lygtis pereina į laisvos dalelės judėjimo radialiąją lygtį.

$$\frac{d^2(rR_l)}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}\right](rR_l) = 0. \tag{38}$$

Kai $E > 0$, šios lygties tiesiškai nepriklausomi sprendiniai yra sferinės Beselio j_l ir Neimano h_l funkcijos. Iš jų sudaromas bendrasis (35) lygties sprendinys:

$$R_l(r) = \frac{u_l(r)}{r} = A_l j_l(kr) + B_l h_l(kr); \quad r > d. \tag{39}$$

Vietoje integravimo konstantų patogu parinkti šitokias:

$$A_l = C_l \cos\delta_l; \quad B_l = -C_l \sin\delta_l. \tag{40}$$

Tuomet

$$R_l(r) = \frac{u_l(r)}{r} = C_l\left\{\cos\delta_l j_l(kr) - \sin\delta_l h_l(kr)\right\}; \quad r > d. \tag{41}$$

Įrašius į (41) sferinių Beselio ir Noimano funkcijų asimptotikas (11) ir (12), lengvai galima įsitikinti, kad (39) tenkina reikiamą asimptotikos sąlygą.

Taigi, reikia surasti (35) lygties sprendinį vidinėje potencialo veikimo srityje $0 \le r \le d$ ir ant ribos $r = d$ jį sudurti su laisvos dalelės sprendiniu (41), kai $r > d$. Sprendinį vidinėje srityje pažymeėkime $R_l^{vid}(r)$. Jo sudūrimą su (41) sprendiniu galime užrašyti šitaip:

$$R_l^{vid}(d) = C_l\left\{\cos\delta_l\, j_l(kd) - \sin\delta_l\, h_l(kd)\right\}, \tag{42}$$

$$\frac{R_l^{vid}(r)}{dr}\Big|_{r=d} = kC_l\left\{\cos\delta_l\, j_l'(kd) - \sin\delta_l\, h_l'(kd)\right\}.$$

Čia $j_l'(x) \equiv d(j_l(x))/dx$. Įveskime $R_l^{vid}(r)$ funkcijos logaritminę išvetinę:

$$f_l \equiv \frac{1}{R_l^{vid}(r)} \frac{dR_l^{vid}(r)}{dr}\bigg|_{r=d} \tag{43}$$

ant potencialo veikimo ribos $r = d$. Surandame konstantą C_l iš (42) formulės ir išreiškiame sklaidos fazę logaritmine išvestine f_l:

$$\tan\delta_l = \frac{j_l'(kd) - \frac{f_l}{k}\, j_l(kd)}{h_l'(kd) - \frac{f_l}{k}\, h_l(kd)}. \tag{44}$$

Reikia atkreipti dėmesį, kad konstantoje C_l yra is laisvai parenkamas sprendžiant (3) lygtį funkcijos $R_l^{vid}(r)$ normavimo daugiklis.

Pavyzdžiai

Pirmasis pavyzdys. Surasime sklaidos fazę, kai dalelė sklaidoma stačiakampės duobės potencialu:

$$V(r) = \begin{cases} -V_o, & r \le d, \\ 0, & r > 0. \end{cases} \tag{45}$$

Šitokiam potencialui nereikia skaitmeniškai integruoti (3) lygties, norint surasti $R_l^{vid}(r)$, nes sprendinys žinomas iš kvantinės mechanikos vadovėlio:

$$R_l^{vid}(r) = C j_l(Kr), \tag{46}$$

kur

$$K = \frac{\sqrt{2\mu(E + V_0)}}{\hbar}, \tag{47}$$

o logaritminė išvestinė yra:

$$f_l = K \frac{j'(Kd)}{j_l(Kd)}, \tag{48}$$

kurią įrašę į (44) formulę surandame sklaidos fazę:

$$\tan\delta_l = \frac{k j_l(Kd) j_l'(kd) - K j_l'(Kd) j_l(kd)}{k h_l'(Kd) j_l(kd) - K j_l'(Kd) h_l(kd)}. \tag{49}$$

Antrasis pavyzdys. Tegul dalelę sklaido absoliučiai kieta sfera. Tada jos viduje $R_l^{vid}(r) = 0$, o sferos paviršiuje ($r = d$) dalelės laisvo judėjimo sprendinys turi būti

$$R_l(d) = 0. \tag{50}$$

Įrašome (50) į (41) ir gauname, kad

$$\tan\delta_l = j_l(kd)/h_l(kd). \tag{51}$$

Dalelės mažų energijų atskiru atveju tinka (30) ir (31) Beselio ir Neimano funkcijų išraiškos, kurias įrašę į (51) surandame šitokią sklaidos fazę:

$$\delta_l|_{kd\ll 1}= -\frac{(kd)^{2l+1}}{(2l+1)!!(2l-1)!!}. \tag{52}$$

Perturbacijų teorijos metodas.

Jeigu potencialas $V(r)$ mažas, srityje $r < d$ radialiosios funkcijos išraiškoje (10) galima palikti tiktai pirmąjį narį, nes antrasis narys bus daug mažesnis. Tuomet $R_l(r) \approx i^l(2l+1)j_l(kr)$ įrašome į (29) ir surandame sklaidos fazę ir sklaidos amplitudę:

$$e^{i\delta_l}\sin\delta_l \approx -k\int_0^\infty \frac{2\mu}{\hbar^2}V(r)[j_l(kr)]^2r^2dr, \tag{53}$$

$$f_l \approx -(2l+1)\int_0^\infty \frac{2\mu}{\hbar^2}V(r)[j_l(kr)]^2r^2dr. \tag{54}$$

Matome, kad f_l (54) yra reali. Menamoji dalis yra lygi nuliui, kas pažeidžia optinę teoremą. Toks rezultatas nėra geras. Tačiau, kai sklaidos fazė δ_l maža, tai sklaidos amplitudės menamoji dalis $Imf_l = (2l+1)k^{-1}\sin^2\delta_l$ ir sklaidos pilnutinis skerspjūvis $\sigma_l = (4\pi/k^2)(2l+1)\sin^2\delta_l$ priklauso nuo sklaidos fazės kvadrato δ_l^2. Todėl galima teigti, kad optinė teorema tenkinama apytikriai, t.y. iki narių, proporcingų δ_l^2.

Taigi perturbacijų teorijos taikymo sklaidos fazėms surasti sąlyga yra sklaidos fazių mažumas

$$|\delta_l| \ll 1. \tag{55}$$

(53) artinys sklaidos fazėms apskaičiuoti, kai galioja (55) sąlyga, vadinamas **Borno artiniu sklaidos fazėms**. Šiame artinyje sklaidos fazės skaičiuojamos pagal formulę (panaudota $\sin\delta_l|_{\delta_l\ll 1}\approx \delta_l$):

$$\delta_l^{(B)} = -k\int_0^\infty \frac{2\mu}{\hbar^2}V(r)[j_l(kr)]^2r^2dr. \tag{56}$$

Iš (56) matyti, kad, jeigu $V(r) < 0$ (traukos potencialas), visos Borno sklaidos fazės $\delta_l^{(B)} > 0$. Iš (23) seka, kad $r > d$ srities radialiosios banginės funkcijos tarsi prisitraukia prie potencialo veikimo ribos (osciliuoja tankiau). Kai $V(r) > 0$, $\delta_l^{(B)} < 0$, ir išorinės dalies radialiosios funkcijos osciliacijos tarsi atsistumia toliau nuo $r = d$ srities (osciliuoja rečiau).

Kada sklaidos fazė būna maža? Atsakymo ieškosime dviem ribiniams atvejams, kai dalelės bangos ilgis ($\lambda = 1/k$) $\lambda \gg d$ ir $\lambda \ll d$.

Kai $\lambda \gg d$, t.y. $kd \ll 1$, į (56) įrašome (30) artinį ($k \to 0$) ir gauname, kad

$$|\delta_l^{(B)}| = \frac{k^{2l+1}}{[(2l+1)!!]^2}\frac{2\mu}{\hbar^2}\left|\int_0^\infty V(r)2r^{2l+2}dr\right| \approx \frac{(kd)^{2l+1}}{[(2l+1)!!]^2(2l+3)}\frac{2\mu|\overline{V}|d^2}{\hbar^2}, \tag{57}$$

kur d – potencialo veikimo vidutinis atstumas, o $\overline{V}$ – vidutinė sąveikos amplitudė. Kai sferinis potencialas pakeičiamas stačiakampe duobe, iš kvantinės mechanikos žinome, kad surištų būsenų egzistavimo sąlyga yra:

$$2\mu V_0 d^2/\hbar^2 \geq \pi^2/4. \tag{58}$$

Jeigu potencinėje duobėje yra du ar trys lygmenys, tuomet parametro $2\mu|\overline{V}|d^2/\hbar^2$, kuris proporcingas $|\delta_l^2|$, reikšmė siekia keletą vienetų. Iš (57) formulės matyti, kad (55) sąlyga gali galioti didelėms l reikšmėms, bet negalioti mažoms l rekšmėms. Taigi Borno artinys blogiausiai tinka s ($l = 0$) bangai. Iš (25) matyti, kad s bangos indėlis sklaidos amplitudėje mažiausias, kai sklaidoma mažais kampais. Galime padaryti šitokią išvadą: jeigu dalelės energija ir potencialo veikimo spindulys tokie, jog galioja sąlyga $kd \ll 1$, tai Borno artinys geriau tinka sklaidai mažais kampais, nei sklaidai dideliais kampais.

Jeigu $\lambda \ll d$, t.y. $kd \gg 1$, tai sklaidos fazei įvertinti reikia į (56) formulę įrašyti (12) išraišką ($k \to \infty$). Tuomet sklaidos fazė yra šitokia:

$$|\delta_l^{(B)}| = k\frac{2\mu}{\hbar^2}\left|\int_0^d V(r)\frac{\sin^2(kr - l\pi/2)}{k^2r^2}r^2dr\right| \approx \frac{\mu|\overline{V}|}{\hbar^2}\frac{d}{k}. \tag{59}$$

Šiuo atveju Borno artinio galiojimo sąlyga yra:

$$|\overline{V}| \ll \frac{1}{kd}\frac{\hbar^2k^2}{\mu}. \tag{60}$$

Ji visai nepriklauso nuo l ir sutampa su trečioje paskaitoje surasta sąlyga (3.16), kuri reiškia, kad Borno artinys galioja, kai arba dalelės energija didelė, arba sąveika yra silpna.